DISEÑO DE PROCESOS EN INGENIERÍA QUÍMICA



Arturo Jiménez Gutiérrez

Editorial Reverté, S. A.

Diseño de procesos en

Ingeniería Química

Diseño de procesos en

Ingeniería Química

Arturo Jiménez Gutiérrez

Instituto Tecnológico de Celaya
Departamento de Ingeniería Química
Celaya, Gto.

Título de la obra:
Diseño de procesos en Ingeniería Química

Arturo Jiménez Gutiérrez
Profesor Investigador del Departamento de Ingeniería Química
Instituto Tecnológico de Celaya
Celaya, Guanajuato
MÉXICO

Revisada por:
José Costa López
Catedrático de Ingeniería Química
Departamento de Ingeniería Química y Metalurgia
Universidad de Barcelona
ESPAÑA

Propiedad de:
EDITORIAL REVERTÉ, S. A. y
Loreto, 13-15, Local B
08029 Barcelona
Tel: (34) 93 419 33 36
Fax: (34) 93 419 51 89
E-mail: reverte@reverte.com
Internet: http://www.reverte.com

REVERTÉ EDICIONES, S.A. DE C.V.
Río Pánuco 141 Col Cuauhtémoc
C.P. 06500 México, D.F. - México
Tel: (52) 55.5533.5658
Fax: (52) 55.5514.6799
E-mail: reverte@reverte.com.mx

Edición en español

Impreso en España - Printed in Spain

ISBN: 84-291-7277-7 ESPAÑA
ISBN: 968-6708-51-0 MÉXICO

Depósito Legal: B-8579-2003

Impreso por Domingraf Impressors
Pol. Ind. Can Magarola
808100 Mollet del Vallés (Barcelona)

PREFACIO

El área de diseño de procesos es una de las que han sufrido más cambios a nivel mundial en la enseñanza de la ingeniería química en los últimos años, reflejo de los resultados de esfuerzos científicos, soportados por equipo de cómputo cada vez más poderosos. El enfoque provocado por los conceptos inherentes a la síntesis de procesos ha sido otro de los factores que han contribuido a este aspecto. Hoy en día, el curso de Diseño de Procesos forma una parte medular en la educación del ingeniero químico, pues integra los conocimientos de varias disciplinas y propociona una visión global del campo de la ingeniería química.

El material contenido en este texto refleja mi experiencia en la enseñanza de este curso en el Instituto Tecnológico de Celaya, y en su etapa inicial en la Universidad de Wisconsin. Este material ha servido también de base para cursos de actualización que he impartido hacia profesores universitarios del país y para ingenieros de proceso de la industria de México. La obra está organizada en tres partes. La Parte I cubre los principios fundamentales de análisis económico de procesos, la Parte II trata sobre principios de optimización, y finalmente la Parte III proporciona un tratado sobre aspectos relacionados con la síntesis de procesos. En buena medida, las partes I y II sirven de base para la Parte III. El texto ha sido diseñado para su uso a nivel de licenciatura, aunque el material de síntesis de procesos puede usarse para establecer las bases sobre las cuales se elabora un tratado más profundo a nivel de posgrado.

El Capítulo 2 cubre métodos rápidos para llevar a cabo análisis económicos preliminares sobre tecnologías químicas. En el Capítulo 3 se describe principalmente el método de Guthrie para la estimación de costos de inversión en

componentes de equipo. Aunque este método no es reciente, representa un trabajo bastante referido en el campo y su uso constituye un buen ejercicio académico. El Capítulo 4 introduce al estudiante con el concepto de grados de libertad y la selección adecuada de variables de diseño. En algún momento utilicé un experimento de omitir este contenido en mis cursos, debido a que el uso de simuladores automatiza muchos de estos aspectos, y encontré que los estudiantes tuvieron mayores dificultades conceptuales con el tema de optimización, por lo cual la versión final de este texto incluye este tema previo al tratado de principios de optimización. El Capítulo 5 cubre dos métodos para optimizar sistemas con una variable. El tema de optimización tiene un alcance bastante amplio, y en esta obra se intenta familiarizar al estudiante con este tipo de casos y cubrir métodos para la solución de problemas con una variable de optimización. Un buen número de diagramas de flujo de procesos químicos pueden modelarse como sistemas con estructura secuencial, lo cual los hace susceptibles a optimizarse mediante la técnica de programación dinámica que se expone en el Capítulo 6.

El Capítulo 7 comienza el estudio sobre síntesis de procesos con la búsqueda de sistemas de reacciones. En el Capítulo 8 se tratan diversos métodos para la generación de alternativas de diagramas de flujo para la separación de mezclas en sus componentes espcificados. La selección de sistemas de separación constituye un problema de amplia aplicación industrial. Se presentan reglas heurísticas y métodos algorítmicos para la síntesis de sistemas de separación, y se tratan de establecer reglas prácticas consolidadas a través de los resultados de métodos formales de optimización. Los capítulos restantes cubren material relacionado con la integración de energía en procesos. El tratado da un énfasis notable al método del punto de pliegue, debido a que constituye uno de los enfoques más ampliamente utilizados en la investigación científica de este campo, y a que ofrece un amplio potencial de uso práctico. En el Capítulo 9 se muestra cómo puede obtenerse una predicción de requerimientos mínimos de servicios energéticos externos previo al diseño de la red de intercambiadores de calor, y se establece que mediante la identificación del punto de pliegue de la red se puede diseñar una estructura de intercambio de calor que consuma la mínima cantidad de servicios. La predicción de los requerimientos de energía se complementa con la estimación de los requerimientos de área de transferencia de calor de una red que se expone en el Capítulo 10. La combinación de estos conceptos permite un diagnóstico de requerimientos de área y energía muy ágil y útil para estudios de uso eficiente de energía en procesos. Finalmente, el Capítulo 11 muestra cómo los principios fundamentales del método del punto de pliegue pueden usarse para desarrollar un diagnóstico de una red de intercambiadores de calor existente, y cómo puede establecerse una guía para la revisión de esa red instalada.

Cabe mencionar que el tratado de los tópicos de síntesis de procesos reflejan mi sentir personal sobre la orientación de la enseñanza en este campo. He tratado de mostrar en la enseñanza de este curso cómo el conocimiento que se gana de ensayos científicos formales no sólo estriba en la aplicación rigurosa de un método de programación matemática, sino que puede muchas veces proporcionar un entendimiento que hace posible la elaboración de soluciones fáciles a problemas difíciles.

Durante el proyecto de escritura de este libro de texto, el Departamento de Ingeniería Química del Instituto Tecnológico de Celaya ha jugado un papel importante. El apoyo administrativo y los comentarios de aliento de mis cole-

gas fueron de un valor especial para mí. En particular, agradezco a los profesores David Trigueros, Pedro Quintana, Vicente Rico y Fernando Tiscareño el haber usado este material en diferentes etapas de desarrollo, y proporcionar valiosas críticas; espero que esta versión final refleje adecuadamente la inclusión de sus comentarios. El M.C. David Trigueros merece un agradecimiento "dual", pues como director del Instituto Tecnológico de Celaya ha apoyado esta obra y ha hecho posible su publicación en asociación con Editorial Reverté. Y por supuesto, los estudiantes que han cursado esta materia usando esta obra como texto a diferentes niveles de elaboración merecen una mención especial; sus comentarios han sido también de gran valor, tanto por su influencia en el tratado técnico de la obra como por el estímulo humano que para mí han significado.

Agradezco también al Dr. José Costa, catedrático de la Universidad de Barcelona, el haber leído el manuscrito del libro previo a su publicación. He incluido varias de sus valiosas sugerencias que considero han enriquecido la presentación final de esta obra.

El Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología me otorgó la distinción de una Cátedra Patrimonial de Excelencia Nivel III para el desarrollo de esta obra. Me parece importante resaltar que el objetivo de promover la escritura de libros de texto debe ser un esfuerzo continuo para poder tener resultados más notables como parte de una mayor madurez académica en México.

Mi gratitud y un pensamiento especial para quien fungió como mi asesor hace años durante mis estudios doctorales en la Universidad de Wisconsin, el Profesor Emérito Dale F. Rudd. Sus valiosas contribuciones en el área de la síntesis de procesos son bastante reconocidas; además de ello, deseo resaltar su alta calidad humana y el apoyo que siempre recibí de él. También expreso el agradable recuerdo de aquellas clases durante mis estudios de Maestría en el Tecnológico de Monterrey con el Ing. Ramón de la Peña, en las cuales se trataban las ideas iniciales del campo de la síntesis de procesos.

La vida me ha favorecido con los brillantes estudiantes a quienes he tenido oportunidad de dirigir durante sus estudios de Maestría y Doctorado. Quiero compartir con todos ellos, mi "familia académica", esta obra y agradecerles sus valiosos comentarios de apoyo en diferentes etapas de su desarrollo.

Los apoyos personales y familiares juegan un papel importante en este tipo de proyectos. De mi madre aprendí muchas cosas, entre ellas la importancia de la constancia para lograr objetivos en la vida, un aspecto que al escribir un libro de texto es un requisito indispensable. Gracias Nancy, por atenderla como lo has hecho en momentos difíciles. A mis hijos, Nadia, Claudia, Arturo y Erick, les expreso mi amor y el recuerdo de la importancia que tienen en mi vida. Y a Eréndira, mi compañera de mi vida, le agradezco de manera especial su constante apoyo personal y profesional durante el desarrollo de esta obra.

Arturo Jiménez Gutiérrez

SUMARIO

- **CAPÍTULO 1** La industria química 1

PARTE I **Análisis económico 5**

- **CAPÍTULO 2** Análisis económico de procesos 7
- **CAPÍTULO 3** Estimación de costos de inversión 37

PARTE II **Optimización 57**

- **CAPÍTULO 4** Selección de variables de diseño 59
- **CAPÍTULO 5** Principios de optimización 79
- **CAPÍTULO 6** Programación dinámica 107

PARTE III **Síntesis de procesos 127**

- **CAPÍTULO 7** Síntesis de procesos 129
- **CAPÍTULO 8** Síntesis de sistemas de separación 147
- **CAPÍTULO 9** Síntesis de redes de intercambiadores de calor 193
- **CAPÍTULO 10** Predicción de áreas en redes de intercambiadores de calor 217
- **CAPÍTULO 11** Análisis de redes de intercambiadores de calor existentes 217

ÍNDICE ALFABÉTICO 255

ÍNDICE ANALÍTICO

CAPÍTULO 1 **La industria química 1**
1.1 La industria y el dinero 1
1.2 Investigación y desarrollo tecnológico 1

PARTE I **ANÁLISIS ECONÓMICO 5**
CAPÍTULO 2 **Análisis económico de procesos 7**
2.1 Componentes de la economía de un proceso 8
2.2 Criterios para la evaluación económica de procesos 10
2.3 El valor del dinero en el tiempo 13
2.4 Efectos del tiempo en la inversión 14
2.5 Ajuste de inversiones debido a la capacidad y economías de escala 16
2.6 Estimación de precios de venta 19
2.7 Fuentes de información 19
Referencias 27
Problemas 27

CAPÍTULO 3 **Estimación de costos de inversión 37**
3.1 Método de Lang 39
3.2 Método de Guthrie 40
Referencias 51
Problemas 51

PARTE II OPTIMIZACIÓN 57

CAPÍTULO 4 Selección de variables de diseño 59

4.1 Modelación de procesos 60
4.2 El concepto de grados de libertad 60
4.3 Algoritmo de Lee y Rudd 62
Referencias 72
Problemas 73

CAPÍTULO 5 Principios de optimización 79

5.1 Técnicas de optimización 80
5.2 Optimización de una variable 80
5.3 El Método de la Sección Dorada 82
5.4 Método de Fibonacci 87
5.5 Otros métodos de optimización 96
Referencias 96
Problemas 97

CAPÍTULO 6 Programación dinámica 107

6.1 El principio de optimalidad de Bellman 108
6.2 Tipos de aplicaciones 109
Referencias 120
Problemas 120

PARTE III SÍNTESIS DE PROCESOS 127

CAPÍTULO 7 Síntesis de procesos 129

7.1 Etapas en ingeniería de procesos 130
7.2 Desarrollo de diagramas de flujo 131
7.3 Síntesis de sistemas de reacción 133
Referencias 141
Problemas 141

CAPÍTULO 8 Síntesis de sistemas de separación 147

8.1 Selección de procesos de separación 148
8.2 Diseño de columnas de destilación 149
8.3 Análisis económico de columnas de destilación 151
8.4 Técnicas de síntesis de sistemas de separación 156
8.5 Uso de reglas heurísticas 157
8.6 Uso de programación dinámica 160
8.7 Un método combinado heurístico-evolutivo 166
8.8 Un método rápido 171
8.9 Análisis de sistemas de destilación complejos 174
Referencias 177
Problemas 178

CAPÍTULO 9 Síntesis de redes de intercambiadores de calor 193

9.1 Formulación del problema 194
9.2 El concepto de ΔT mínima 194
9.3 Uso de diagramas de contenido de calor 195
9.4 El método del punto de pliegue 196
Referencias **207**
Problemas **207**

CAPÍTULO 10 **Predicción de áreas en redes de intercambiadores de calor 217**

10.1 Construcción de las curvas compuestas 218
10.2 Curvas compuestas balanceadas 220
10.3 La gran curva compuesta 220
10.4 Predicción de áreas de transferencia de calor 221
Referencias 224
Problemas 225

CAPÍTULO 11 **Análisis de redes de intercambiadores de calor existentes 233**

11.1 Diagnóstico de la red 234
11.2 El principio básico de la revisión 234
11.3 Establecimiento de objetivos 241
Referencias 242
Problemas 243

1

LA INDUSTRIA QUÍMICA

1.1 La industria y el dinero
1.2 Investigación y desarrollo tecnológico

La aplicación de los conceptos de diseño de procesos que se presentan en esta obra están centrados en la industria química. En este capítulo introductorio se establece una breve semblanza del sentido de la industria química.

1.1 La industria y el dinero

La industria química representa un importante sector en el mundo actual. Su impacto en la economía y en nuestro estándar de vida es evidente. Prendas de vestir, partes de automóviles, juguetes, resinas, cosméticos, etc. provienen de la operación de procesos químicos. El ingeniero químico debe estar capacitado para el análisis y diseño de procesos que satisfagan una necesidad de la sociedad.

La industria química opera bajo un escenario económico y un ambiente competitivo. Existen fuertes interrelaciones entre componentes industriales tales que la introducción de una nueva tecnología puede afectar a varios procesos que componen en un momento dado la estructura de la industria, la cual debe adaptarse constantemente a cambios de mercados y patrones de desarrollo. Puede conceptualizarse que si una reacción química del tipo

$$\text{Reactivos} \longrightarrow \text{Productos}$$

establece el corazón de un proceso químico, otra similar del tipo

$$\$ + \text{Reactivos} \longrightarrow \text{Productos} + \$$$

establece el marco económico de operación de ese proceso. Es evidente que la cantidad de dinero que se obtiene de la operación debe exceder a la cantidad que se requiere como insumos para que el proceso tenga éxito.

1.2 Investigación y desarrollo tecnológico

La penetración de un nuevo proceso en el ámbito industrial debe cumplir criterios de viabilidad técnica y viabilidad económica. El desarrollo de nuevas tecnologías es un camino que requiere de varias etapas: estudios de mercados, investigación básica, investigación aplicada, estudios económicos de rentabilidad, comercialización, arranque y operación de la planta. La Figura 1.1 muestra por ejemplo el tiempo requerido para el desarrollo del proceso de KAPTON, una película poliamídica usada para aislamientos eléctricos, ropa a prueba de fuego, circuitos impresos y otros productos especiales. Este proceso fue desarrollado por la compañía Du Pont. Una vez obtenido el producto a escala laboratorio, la comercialización del proceso duró casi cinco años. Para lograr esta meta, varias de las etapas posteriores a la de investigación hubieron de iniciarse antes de que la etapa anterior estuviera terminada; de otra manera, la comercialización del proceso hubiera durado más de nueve años. Resulta claro que este tipo de acciones requieren de riesgos calculados por parte de la gente encargada de la toma de decisiones.

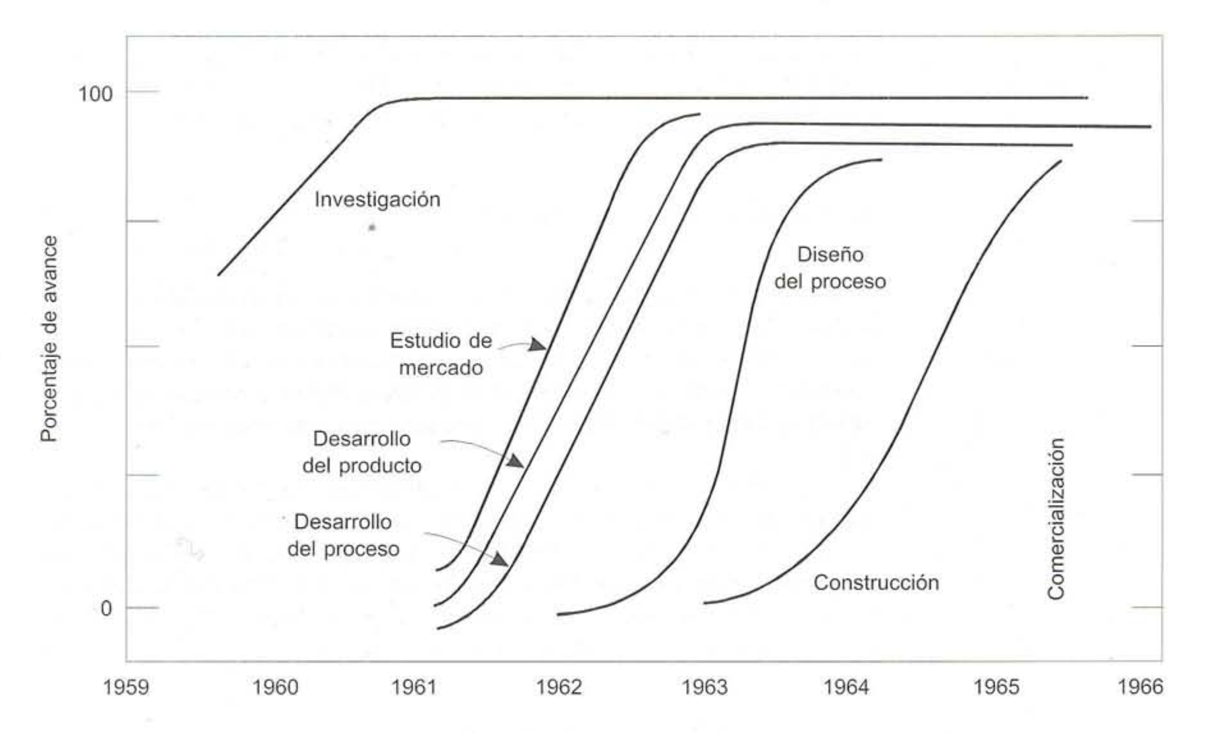


FIGURA 1.1
Etapas en el desarrollo de la película poliamídica "KAPTON".

Algunos puntos que deben tomarse en cuenta en el estudio previo de mercado son: disponibilidad de materias primas, disponibilidad de recursos energéticos, demanda del producto, disponibilidad de inversión, posibles incentivos fiscales, entre otros. Deben establecerse los niveles presentes y las tendencias de estos factores.

Es importante establecer el marco de competencia en el cual se desenvolverá un determinado proyecto. Puede tratarse de un producto ya existente o del desarrollo de un nuevo compuesto en el mercado. Para el primer caso, el marco económico está bien establecido, ya que la referencia sería el precio de venta de ese producto. En el segundo caso, un análisis económico debe desembocar en el precio de venta que ese nuevo producto deberá tener, sin perder de vista que las propiedades novedosas de ese producto deben superar a aquellas de los compuestos que se utilizan para aplicaciones similares en la economía.

Muchos desarrollos toman un tiempo apreciable para llegar a un buen entendimiento y a resultados técnicos favorables. Sin embargo, al tratar de integrar ese proceso en un ambiente industrial existente, es muy común encontrar que su análisis económico arroja un resultado desfavorable. ¡En tales casos, se tienen varios años de investigación perdidos! Sería conveniente entonces tener la posibilidad de estimar, dentro de un nivel aceptable de precisión, el costo de producción del potencial proceso que emergería de ese programa de investigación básica.

En este libro se establecen algunas técnicas de análisis económico y de diseño de procesos. Siempre que sea posible, se trata de desembocar en reglas de diseño rápidas que establezcan buenas soluciones. En los capítulos 2 y 3 se tratan métodos para la estimación de costos de operación y de costos de inversión en procesos. Los capítulos 4, 5 y 6 cubren principios de optimización y algunos métodos simples para la optimización de algunos sistemas ingenieriles. Los capítulos restantes cubren material relacionado con la síntesis de procesos químicos. Se establece un estudio de sistemas de reacción (Capítulo 7), sistemas de separación (Capítulo 8) y sistemas con integración de energía (capítulos 9, 10 y 11).

PARTE I

ANÁLISIS ECONÓMICO

2

ANÁLISIS ECONÓMICO DE PROCESOS

2.1 Componentes de la economía de un proceso
2.2 Criterios para la evaluación económica de procesos
2.3 El valor del dinero en el tiempo
2.4 Efectos del tiempo en la inversión
2.5 Ajuste de inversiones debido a la capacidad y economías de escala
2.6 Estimación de precios de venta
2.7 Fuentes de información

Un proceso industrial (o un nuevo proceso) sólo tiene estabilidad en el mercado (o perspectivas de comercialización) si su aspecto económico es favorable. En este capítulo se presentan algunas técnicas para el análisis económico de procesos.

Podemos identificar tres tipos de niveles para el diseño de un proceso:

1. Diseño preliminar.
2. Estudio de preinversión.
3. Diseño final, o ingeniería de detalle.

En el primer nivel se toma información básica del proyecto, con diseños aproximados y escenarios económicos simples, para llegar a un diagnóstico preliminar sobre el potencial económico del proceso. Esta etapa debe hacerse en forma tan rápida como sea posible, para tomar la decisión de continuar con el proyecto, si existe un potencial favorable, o terminarlo y no invertir tiempo adicional en él si es claro que el proceso no tiene perspectivas económicas razonables.

En el segundo nivel, el panorama promisorio del proceso amerita un diseño más elaborado y un análisis económico más riguroso, con estimaciones de inversiones más confiables y costos de operación más desglosados. Se aplica el mismo tipo de lógica; el proceso debe volver a analizarse para examinar su potencial económico y dictaminar si se debe continuar con su proyecto de comercialización.

El tercer nivel típicamente se lleva a cabo por una firma especializada, con el fin de elaborar diseños finales y planos para la construcción del equipo. Dada la información que se genera en forma de un diseño final, las estimaciones económicas a este nivel son las más exactas que se pueden tener para la etapa de diseño del proceso, y consituyen los mejores pronósticos de lo que se espera durante la operación comercial del proceso.

Debido al enfoque de esta obra, se presentan en este capítulo los principios y los elementos de análisis económico aplicables en la etapa inicial del diseño de un proceso. Estos resultados preliminares proporcionan un rápido diagnóstico inicial del potencial económico de la alternativa bajo consideración, de tal manera que un diagnóstico positivo deberá complementarse a medida que las etapas posteriores del proceso se llevan a cabo.

2.1 Componentes de la economía de un proceso

Para establecer una actividad económica se requiere de una inversión. A cambio de esa inversión se obtienen ingresos en forma de ventas, las cuales deben ofrecer un excedente adecuado sobre los costos que implica la operación del proceso para que éste tenga un potencial favorable de comercialización. La inversión requerida puede descomponerse en una inversión fija, I_F, y un capital de trabajo o circulante, I_w:

$$I = I_F + I_w \tag{2.1}$$

donde I es la inversión total, I_F incluye la inversión o capital inmovilizado en componentes del proceso, tales como columnas, reactores, bombas, etc., y el capital de

trabajo o circulante representa la cantidad que se estipula para mantener la operación del proceso bajo variaciones en la disponibilidad de insumos (por ejemplo, el capital de trabajo puede consistir en tener disponible un mes de inventarios).

A su vez, la inversión fija se puede dividir en dos partidas,

$$I_F = I_E + I_A \qquad (2.2)$$

donde I_E se refiere a los componentes principales del proceso, mientras que I_A incluye la inversión en equipo auxiliar tal como generadores de vapor, torres de enfriamiento, etc.

Esta división de la inversión de un proceso en sus componentes de inversión de equipo principal, equipo auxiliar y capital de trabajo está relacionada con el riesgo inherente en este tipo de actividades económicas. Desde un punto de vista de riesgo, la inversión en equipo principal sería la más difícil de recuperar si el proyecto fracasara, mientras que el capital de trabajo es el que ofrece el menor grado de riesgo.

El costo de operación de un proceso puede evaluarse por unidad de tiempo (\$/año), o por unidad de producción (\$/kg). Este concepto incluye los costos asociados con la inversión, los costos variables y los costos de mano de obra:

$$C = a\, I_F + b\, MP + c\, E + d\, MO - p\, SP \qquad (2.3)$$

donde *C* es el costo de operación del proceso; *a* es un factor que considera gastos anuales como regalías, mantenimiento, etc., los cuales no es posible predecir con detalle en un nivel preliminar, pero que pueden estimarse como una fracción de la inversión fija; *b* es el costo unitario de cada materia prima *MP*; *c* es el costo de cada servicio *E*; *d MO* es el costo de mano de obra y *p* es el precio de cada subproducto *SP* que se pudiera producir en el proceso además del producto principal. Dependiendo de las unidades de los rubros principales (I, MP, etc.), las cuales pueden estar en base anual o por unidad de producto, *C* será un costo de operación anual o unitario. Para fines de ilustración, se supone en lo que resta de este capítulo que el costo de operación se contabiliza en forma anual.

Si S son las ventas anuales, la utilidad bruta o beneficio bruto R se define como la diferencia entre las ventas y el costo de operación anual:

$$R = S - C \qquad (2.4)$$

La utilidad neta (o beneficio neto) P se calcula restando de la utilidad bruta la depreciación del equipo y el pago de impuestos,

$$P = R - e\, I - t(R - d\, I) \qquad (2.5)$$

donde e es el factor de depreciación para fines contables, d es el factor de depreciación para fines de impuestos y t es la tasa de impuestos.

2.2 Criterios para la evaluación económica de procesos

En base a los principios presentados anteriormente, se pueden establecer algunos criterios para comparar alternativas en una base económica.

Tasa de retorno

La tasa de retorno o tasa de recuperación es una de las medidas más usadas para medir la rentabilidad de un proceso. Se define como el beneficio neto dividido por la inversión total del proceso:

$$ROI = \frac{P}{I} \tag{2.6}$$

Para que una alternativa tenga atractivo, ROI debe ser mayor que un valor mínimo establecido por la compañía.

$$\mathrm{ROI} > i_{mín} \tag{2.7}$$

La tasa de recuperación mínima se establece en base a situaciones económicas en el mercado y en función del riesgo que implica la operación industrial bajo consideración. Un valor base lo establecería la tasa de rendimiento que ofrece un sistema bancario en ese momento. Si la alternativa presenta un alto grado de riesgo o incertidumbre, entonces se agregaría un valor de seguridad que la misma compañía establecería para fijar el valor arriba del cual se requeriría que cayera la estimación de la tasa de retorno para que el proyecto fuera considerado como atractivo para su comercialización.

Beneficio extra

El beneficio adicional con respecto al beneficio mínimo establecido por la compañía es otro criterio que puede usarse para evaluar alternativas:

$$\mathrm{V} = \mathrm{P} - i_{min}\,\mathrm{I} \tag{2.8}$$

Resulta claro que si ROI > i_{min} se cumple, entonces V será positiva, lo cual establece el requisito para factibilidad económica usando este criterio,

$$\mathrm{V} > \mathrm{O} \tag{2.9}$$

Debe aclararse a este nivel que no necesariamente la alternativa con mayor ROI tendrá el mayor beneficio extra. El lector debe hacer un análisis de esta situación para corroborar este aspecto.

Tiempo de recuperación de capital

El tiempo de recuperación de capital representa el tiempo que tardaría el inversionista en recuperar todo su capital en el caso hipotético de que todas las utilidades se usaran exclusivamente para ese fin:

$$TR = \frac{I}{P + eI} \qquad (2.10)$$

donde TR es el tiempo de recuperación, y los demás términos ya se han definido previamente.

EJEMPLO 2.1

Una planta para producir formaldehído a partir de metanol requiere una inversión de \$1.8 millones. Otros datos relevantes se dan a continuación.

Capacidad de la planta:	25,000 T/año
Carga inicial de catalizador	2.2 T @ \$25/kg
Vida del catalizador	1 año

Consumos por tonelada de formaldehído:

Metanol	1.15 T @ \$135/T
Electricidad	256 kwh @ \$0.025/kwh
Agua de enfriamiento	75 m^3 @ \$0.0104/m^3
Agua de alimentación para hervidores	3 m^3 @ \$0.25/m^3
Vapor producido	1.58 T @ \$6.88/T

Si el precio de venta del producto es de 229 \$/T (dólares/tonelada métrica), estime la tasa de retorno.

SOLUCIÓN

Calculemos primero el costo de operación.
Costo de materias primas:

$$MP = 1.15 \frac{T}{T\ prod}\left(135 \frac{\$}{T}\right) 25{,}000 \frac{T\ prod}{año} = 3.88 \times 10^6 \frac{\$}{año}$$

Costo anual de consumo de energía:

$$E = \left[256 \frac{kwh}{T\ prod} \left(0.025 \frac{\$}{kwh} \right) + 75 \frac{m^3}{T\ prod} \left(0.0104 \frac{\$}{m^3} \right) + 3 \frac{m^3}{T\ prod} \left(0.25 \frac{\$}{m^3} \right) \right] \times$$

$$\times\ 25{,}000 \frac{T\ prod}{año} = 0.198 \times 10^6 \frac{\$}{año}$$

Crédito por el vapor producido:

$$E\ crédito = 1.58 \frac{T}{T\ prod} \left(6.88 \frac{\$}{T} \right) 25{,}000 \frac{T\ prod}{año} = 0.272 \times 10^6 \frac{\$}{año}$$

Costo del catalizador:

$$Ccat = 2.2 \frac{T}{año} \left(25 \frac{\$}{kg} \right) 1{,}000 \frac{kg}{T} = 0.055 \times 10^6 \frac{\$}{año}$$

Sumando los costos de materia prima, energía neta y catalizador, y tomando el costo de mano de obra y otros como un 5 % de la inversión, se estima el costo de operación del proceso:

$$C = (3.88 + 0.198 - 0.272 + 0.055) x 10^6 + 0.05(1.8 x 10^6)$$
$$= 3.951 \times 10^6 \frac{\$}{año}$$

Las ventas que se obtienen son

$$S = 25{,}000 \frac{T\ prod}{año} \left(229 \frac{\$}{T\ prod} \right) = 5.725 \times 10^6 \frac{\$}{año}$$

La utilidad bruta se obtiene restando el costo de operación a las ventas

$$R = S - C = 1.774 \times 10^6 \frac{\$}{año}$$

Para el cálculo de la utilidad neta tomamos un factor de depreciación del 10% (e = d = 0.1), y una tasa de impuestos del 50% ($t_i = 0.5$); haciendo uso de la Ecuación 2.5 se obtiene

$$P = 0.794 \times 10^6 \frac{\$}{año}$$

Finalmente, la tasa de retorno se evalúa como el cociente entre el beneficio neto y la inversión,

$$ROI = \frac{P}{I} = 0.441$$

o bien

$$\text{ROI} = 44.1\%$$

2.3 El valor del dinero en el tiempo

Los principios presentados en la sección anterior tienen la limitación de que son estáticos en el tiempo, es decir, no incorporan el efecto del tiempo en el valor del dinero. A menudo se requiere comparar alternativas que implican gastos o inversiones en diferentes tiempos. Por ejemplo, una inversión fija en ocasiones debe compararse con los beneficios anuales que se obtienen a cambio de ella. En estos casos es necesario tener una base común para establecer esta comparación debido a que el valor del dinero cambia con el tiempo. Sea I la cantidad de dinero en un tiempo t; el valor presente o actual se estima mediante:

$$\text{VP} = \text{I}\, e^{-it} \tag{2.11}$$

para modelos de contabilidad continua, o bien

$$VP = \frac{I}{(1+i)^t} \tag{2.12}$$

para modelos de contabilidad discreta. En ambos casos, los factores de descuento toman en cuenta el interés i que el dinero ganaría a través del tiempo, por ejemplo al tenerlo en una cuenta bancaria. Para completar el análisis, el término de interés i podría conceptualizarse como un interés neto que incluya también el efecto adverso de la inflación. De cualquier manera, cada compañía en particu-

lar define el nivel de interés mínimo bajo el cual desea establecer su operación, como se mencionó anteriormente.

Se pueden usar métodos basados en el valor presente de alguna utilidad económica para comparación de alternativas. Por ejemplo, las utilidades netas anuales pueden pasarse a tiempo cero para contabilizarse en términos de un valor presente neto. Así, aquella alternativa con el mayor valor presente neto sería la elegida si este parámetro fuera el usado para establecer la comparación entre ellas.

Este método, aunque en principio permite la comparación de estrategias en diferentes tiempos o a largo plazo, tiene la desventaja de que requiere predicciones futuras sobre la economía de un país o un sistema. En países con altos grados de inflación, por ejemplo, este criterio debe usarse con cuidado debido a la inestabilidad de sus índices económicos.

2.4 Efectos del tiempo en la inversión

Las inversiones para un proceso determinado se encuentran publicadas o se evalúan típicamente en función de una capacidad base y de un tiempo base. Ambos aspectos requieren de ajustes para tener la estimación de la inversión en el tiempo deseado y para la capacidad requerida. En esta sección se considera el efecto del tiempo en la inversión, para luego tratar el efecto de la capacidad.

El efecto de la inflación en los costos de inversión de plantas químicas puede cuantificarse mediante el uso de índices especializados. Para pasar la información de la inversión de un proceso de un año base a un año deseado simplemente se toma el cociente de los índices de los años en cuestión.

$$I_{t_2} = I_{t_1}\left(\frac{\acute{I}ndice\ del\ a\tilde{n}o\ 2}{\acute{I}ndice\ del\ a\tilde{n}o\ 1}\right) \tag{2.13}$$

Existen varios índices que se publican en forma periódica. A continuación se describen tres de los índices más comúnmente usados.

El índice de costos de plantas de *Chemical Engineering*

La revista *Chemical Engineering* publica uno de los índices más conocidos para actualizar el costo de plantas químicas. El cálculo de este índice se basa en cuatro rubros con las siguientes proporciones:

Equipo y maquinaria	61%
Mano de obra para construcción	22%
Edificios	7%
Ingeniería y supervisión	10%

Este índice toma como base el periodo 1957-1959. La Tabla 2.1 muestra la evolución histórica del índice.

Tabla 2.1 Valores del índice de construcción de plantas *Chemical Engineering*.			
Año	Índice	Año	Índice
1957-59	100	1986	318.4
1966	107.2	1987	323.8
1968	113.7	1988	342.5
1970	125.7	1989	355.4
1975	182.4	1990	357.6
1976	192.1	1991	361.3
1977	204.1	1992	358.2
1978	218.8	1993	359.2
1979	238.7	1994	368.1
1980	261.2	1995	381.1
1981	297.0	1996	381.7
1982	314.0	1997	386.5
1983	316.9	1998	389.5
1984	322.7	1999	390.6
1985	325.3	2000	394.1

El índice de costo de equipo instalado Marshall y Stevens

El índice Marshall y Stevens, publicado también por la revista *Chemical Engineering* a partir de 1926, se aplica a industrias de proceso y está basado en ocho tipos de industrias:

Cemento	2%
Química	48%
Productos de arcilla	2%
Vidrio	3%
Pintura	5%
Papel	10%
Petróleo	22%
Hule	8%

El índice de costos de construcción de Refinerías Nelson

El índice Nelson se publica en la revista *Oil and Gas Journal* y refleja la variación en el tiempo del costo de construcción de refinerías. Este índice comenzó a publicarse en 1946 y su estimación se basa en los siguientes porcentajes:

Mano de obra especializada	39%
Mano de obra común	21%
Fierro y acero	20%
Materiales de construcción	8%
Equipo misceláneo	12%

Tabla 2.2 Valores del índice Nelson.

Año	Índice	Año	Índice
1946	100	1983	1025.8
1950	146.2	1984	1061.0
1960	228.1	1985	1074.4
1965	261.4	1986	1089.9
1968	304.1	1987	1121.5
1970	364.9	1988	1164.5
1971	406.0	1989	1195.9
1972	438.5	1990	1225.7
1973	468.0	1991	1252.9
1974	522.7	1992	1277.3
1975	575.5	1993	1310.8
1976	615.7	1994	1349.7
1977	653.0	1995	1392.1
1978	701.1	1996	1418.9
1979	756.6	1997	1449.2
1980	822.8	1998	1477.6
1981	903.8	1999	1497.2
1982	976.9	2000	1542.7

La Tabla 2.2 muestra algunos valores históricos del índice Nelson.

Existe también el índice Nelson de costos de operación de refinerías. Un mayor detalle sobre la estimación de los índices Nelson puede encontrarse en:

Farrar, Gerald L., "How Nelson Cost Indexes are Compiled", *Oil and Gas Journal,* 145-146 (30 de diciembre de 1985).

Como una nota adicional, cabe mencionar que existen otros índices que se concentran en datos de costos de plantas europeas. Dentro de estos, se pueden mencionar los índices de construcción de plantas británicas publicados en las revistas *Process Engineer* y *The Cost Engineer*, y el índice de costos de plantas alemanas publicado en la revista *Chemische Industrie*.

2.5 Ajuste de inversiones debido a la capacidad y economías de escala

Datos históricos de inversiones de diferentes tecnologías muestran que el ajuste de la inversión por efecto de la capacidad del proceso sigue una regla exponencial:

$$\frac{I_2}{I_1} = \left(\frac{Q_2}{Q_1}\right)^m \tag{2.14}$$

donde m es un exponente característico de cada tecnología. En caso de no estar disponible, se usa típicamente m = 0.6, lo cual se conoce también como la regla de los 6/10. Desarrollos tecnológicos conducen muchas veces a desarrollar resultan en procesos con exponentes menores que los que previamente se tenían con las tecnologías anteriores. El hecho de que m sea menor que uno implica que una planta de mayor capacidad se traduzca en una menor inversión *unitaria* al hacer el análisis económico del proceso, de ahí el concepto de *economías de escala*.

Adicionalmente, para aprovechar de mejor manera la inversión total hecha en el proceso, conviene operarlo a capacidad total, en caso de que esto sea posible, lo cual depende de la demanda que exista sobre el producto. Esto constituye otro aspecto complementario sobre economías de escala, ya que el costo de producción de un proceso depende del nivel de producción con respecto a la capacidad total de la planta. Considérese la Figura 2.1; la estimación del costo de producción total implica un costo fijo debido a la inversión que se hace para instalar el proceso (la cual es independiente de su nivel de operación), y una contribución lineal (al menos en buena medida) de los costos de materias primas y servicios, los cuales representan los principales componentes de los costos variables. El operar el proceso a niveles cercanos a su capacidad nominal se refleja en menores costos de producción, básicamente por la amortización del capital de inversión fijo sobre una mayor cantidad de producto; el costo unitario del producto, por lo tanto, disminuye a medida que se aumenta el nivel de producción del proceso.

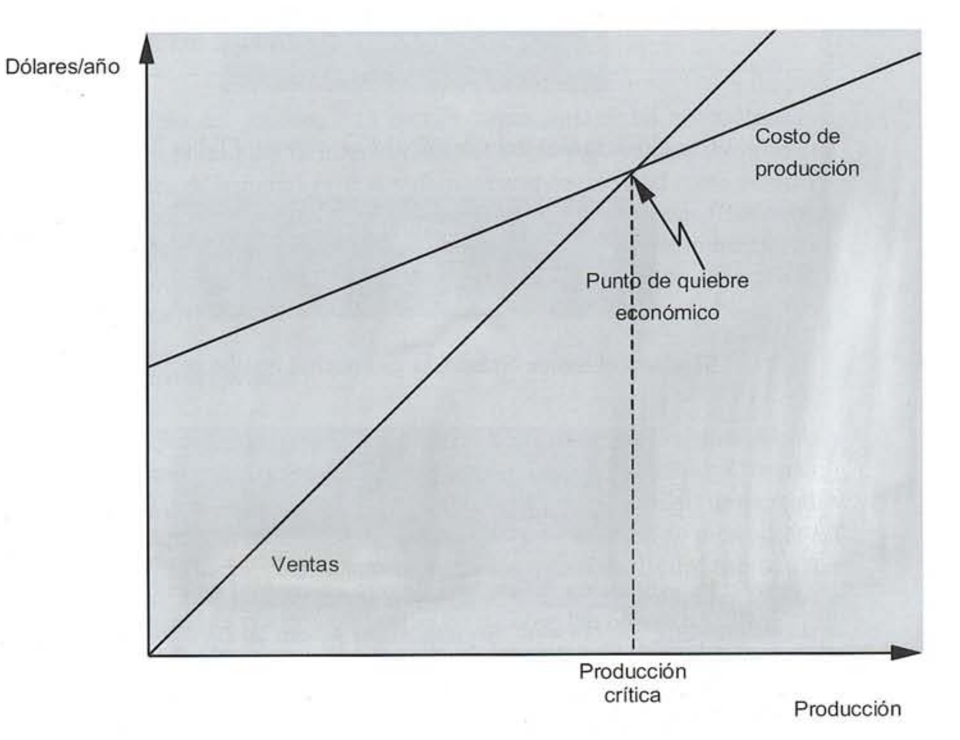


FIGURA 2.1
Economías de escala debido al nivel de producción.

Ejemplo 2.2

Se ha reportado que la inversión requerida para un proceso que produce urea a partir de amoniaco y dióxido de carbono es de 54 millones de dólares, para una capacidad de 340 KT y en dólares de 1977. Estime la inversión requerida para una planta de 250 KT de capacidad en 1984.

Solución

El dato de inversión requiere de ajustes debido a capacidad y al tiempo. El ajuste por capacidad sigue la relación exponencial mostrada en la ecuación 2.14. Como no se conoce el valor del exponente de escalamiento económico para esta tecnología, se supondrá un valor de 0.6.

$$I_2 = \$54 \times 10^6 \left(\frac{250}{340} \right)^{0.6} = \$44.9 \times 10^6$$

Este valor aún se refiere al año base de 1977. Para tomar en cuenta el efecto del tiempo, podemos usar alguno de los índices de construcción de plantas:

$$I_{1984} = I_{1977} \frac{\textit{Índice de } 1984}{\textit{Índice de } 1977}$$

Usando el índice del *Chemical Engineering* (Tabla 2.1),

$$I_{1984} = \$44.9 \times 10^6 \frac{322.7}{204.1} = \$71 \times 10^6$$

Si se usa el índice Nelson, la estimación resulta en,

$$I_{1984} = \$44.9 \times 10^6 \frac{1{,}061}{653} = \$73 \times 10^6$$

La estimación difiere una de otra en un 5%; en esta etapa del análisis o diseño del proceso no es posible conocer cuál será más cercana a la real, y cualquiera de ellas puede usarse para desarrollar un análisis económico preliminar para dictaminar si el proceso tiene potencial o se suspende su consideración. Lo importante a este nivel es

que se tienen elementos para obtener una rápida estimación de la inversión necesaria para una planta química. Si se dictamina que el proceso tiene un potencial preliminar favorable, al final del proyecto se tendrá la información sobre la inversión real requerida en base a negociaciones con la compañía licenciadora de la tecnología, o en base al costo de instalación y diseño de una firma especializada si el proyecto constituye un nuevo desarrollo.

2.6 Estimación de precios de venta

Las ecuaciones de utilidades netas y extras presentan puntos de equilibrio que pueden ligarse a un significado económico. El punto en el cual P = 0 define la situación en la cual la empresa no gana ni pierde globalmente, ya que sus utilidades las usaría para pagar impuestos y recuperar su inversión. En este caso puede estimarse el costo de producción del producto. Cuando V = 0, se tienen las utilidades mínimas definidas por la compañía; en este caso se tendría una manera de estimar el precio de venta mínimo del producto.

Otra manera de estimar un precio de venta es incluyendo una tasa de retorno en la inversión al estimar el costo de producción del proceso. Esto implica que en la ecuación 2.1, el factor a que se asocia a la inversión incluye un factor de depreciación y otro de rentabilidad definido previamente.

Los métodos presentados hasta aquí son técnicas globales y de un alcance general. Dependiendo de las políticas de la compañía, se pueden elaborar estimaciones de mayor nivel de detalle al incluir, por ejemplo, lo que la compañía puede invertir en actividades de investigación, regalías, etc.

2.7 Fuentes de información

Cuando el diseño del proceso está en sus etapas finales, las cotizaciones de proveedores proporcionan la información necesaria para estimar la inversión final y los costos de materias primas y demás componentes del costo de operación del proceso. A nivel preliminar, se pueden consultar algunas fuentes para obtener parte de esta información, la cual es indispensable para tomar decisiones sobre la continuación del proyecto o sobre la selección de alternativas a explorar con mayor detalle.

Precios de materias primas

Una excelente fuente para el precio de materias primas es el *Chemical Marketing Reporter*, una publicación semanal (editorial Schnell Publishing Company) que publica los precios de cientos de productos, además de análisis de mercados de algunos productos, desarrollo de tecnologías y tendencias de mercados. La Tabla 2.3 muestra los precios de varios productos químicos. Es de hacerse notar que los precios de gases no se incluyen en el *Chemical Marketing Reporter* debido a que se fijan en base a negociaciones individuales y generalmente a largo plazo. En la Tabla 2.4 se indican algunos precios de gases recopilados para el año 1975. Estos precios pueden usarse para fines académicos en la solu-

Tabla 2.3 Precios de productos químicos.

Especie \ Año	1986	1996	1999
Acetaldehído	37	46	46
Acetona	25	39	40
Acetato de butilo	52	54	62
Acetato de etilo	41	57	60
Acetato de vinilo	39	44	45
Ácido acético	25	36	38
Ácido acrílico	67	87	87
Ácido adípico	57	70	70
Ácido clorhídrico	65	265	265
Ácido tereftálico	n.d.	37	29
Acrilamida	74	80	80
Acrilonitrilo	40	53	53
Anhídrido acético	43	48	50
Anhídrido maleico	55	51	53
Anilina	40	49	49
Benceno	10	12	9
Butadieno	26	19	13
Butanol	34	50	50
i-Butanol	29	50	50
Ciclohexano	14	17	15
Ciclohexanol	52	83	83
Ciclohexanona	56	73	73
Cloruro de etilo	26	33	33
Cloruro de vinilo	28	21	14
Cumeno	15	19	15
Dicloroetano	n.d.	n.d.	17
Estireno	21	34	22
Etanol	15	38	22
Etilbenceno	22	25	25
Etilenglicol	31	28	19
Etileno	18	24	21
Fenol	25	35	39
Hexano	17	15	15
Hidróxido de sodio	95	113	170
Isopropanol	20	32	34
Metanol	7	7	4
Metil etil cetona	24	46	46
Metil isobutil cetona	35	63	63
Óxido de etileno	35	52	48
Óxido de propileno	48	64	64
p-Xileno	20	35	14
Propanol	42	52	55
Propileno	17	21	12
Tereftalato de dimetilo	65	76	77
Tolueno	18	10	9
Tricloroetano	41	70	100
Xilenos	16	9	10

Nota: Precios dados en ¢/lb (¢ = centavos de dólar.

Fuente: *Chemical Marketing Reporter*, valores correspondientes a mediados de cada año.

Tabla 2.4 Precios de algunos gases (¢/lb en 1975).			
n-Butano	5	Hidrógeno	6
Cloro	7	Isobuteno	5
Dióxido de carbono	1	Metano	1
Etano	3	Propano	4

ción de los problemas propuestos al final del capítulo, ya sea en forma directa o con la aplicación de algún índice económico pertinente.

Inversiones de tecnologías

Existen catálogos como los reportes del SRI (Stanford Research Institute), en los cuales se incluyen detalles técnicos globales de muchas tecnologías, entre ellos la inversión necesaria del proceso. Estos reportes son confidenciales, de tal manera que sólo compañías relacionadas con el área adquieren típicamente estos catálogos. Otras fuentes, aunque no tan completas ni condensadas, aparecen con cierta frecuencia en publicaciones periódicas tipo *Hydrocarbon Processing* y *Chemical Engineering*.

Catálogos de tecnologías

Cuando se considera la posible instalación de un proceso, justificada por la demanda del producto, es conveniente consultar un catálogo de tecnologías para analizar rápidamente el potencial relativo de cada una de ellas. En caso de que ese catálogo no esté disponible, parte del proyecto deberá dedicarse al desarrollo de esa información.

Típicamente, la información de cada tecnología incluye el balance de materia, los requerimientos de energía, y la inversión necesaria para una planta de capacidad base a un tiempo base. El referido reporte del SRI contiene este tipo de información para muchas plantas químicas y petroquímicas.

Una fuente que incluye las características técnicas y económicas de más de 300 tecnologías petroquímicas la constituye el libro de Rudd y col. (*Petrochemical Technology Assessment*, Wiley, 1981). Este catálogo de tecnologías petroquímicas es probablemente el más completo de su género que se ha reportado en una fuente pública. En este texto haremos uso de varios datos tomados del libro de Rudd y col., lo cual amerita una breve explicación sobre la forma en que sus datos se organizaron. Se ilustra esta explicación con los datos reportados para la tecnología de producción de anhídrido maléico mediante oxidación de benceno.

El balance de materia generalmente se reporta por unidad de producción del producto principal. A estos datos se les conoce también como coeficientes técnicos. Para el caso de la tecnología de anhídrido maléico, los siguientes datos reflejan este aspecto.

Productos: 1 tonelada métrica de anhídrido maléico. Coeficiente técnico: 1.00 T/T de producto.

Materias primas: 1.19 toneladas métricas de benceno. Coeficiente técnico: –1.19 T/T de producto.

El balance de energía se da también por unidad de producción del producto principal. La energía se consume en varias formas, como se muestra a continuación para este proceso.

Servicios:

	Consumo unitario	Costo de energía ($/T)
Electricidad consumida	1.30 kwh/T	2.21
Vapor producido	1.6 T/T	−7.68
Combustible consumido	7.94 MBTU/T	15.88
Gas inerte consumido	353 SCF/T	0.14
Agua de proceso		1.59
	Costo neto	12.14

Para actualizar el costo de energía a otro año deberían multiplicarse los consumos unitarios por los precios de cada partida energética en ese tiempo. Una simplificación a esta estimación se lleva a cabo si se indexa el costo total neto al costo de alguna partida energética primaria, por ejemplo aceite combustible. De esta manera se obtiene el costo de energía en unidades de toneladas equivalentes de aceite combustible (FOET, de sus siglas en inglés). Tomando la base usada en esta ilustración (correspondiente a 1977), el precio del aceite combustible de 83 $/T proporciona un costo neto de energía equivalente a 0.15 FOET/T. Una estimación rápida del costo de energía del proceso para cualquier otro tiempo implica solamente la multiplicación de este factor por el precio de aceite combustible en ese tiempo. Debe enfatizarse que esta es la forma en que se normalizó el consumo de energía en la fuente citada (Rudd y col., 1981), y que existen otras formas de reportar consumos de energía, dependiendo de la fuente. Es común tener el desglose de energía, o el costo total neto para un año base.

La inversión se reporta para una capacidad y a un año base. Para este caso, el dato que aplica se muestra en seguida.

Inversión unitaria para una planta de 27 KT de capacidad (1977 $): 910 $/T.

Los datos de inversión que se publican en estos catálogos pudieran requerir de los ajustes de tiempo y de capacidad que se expusieron anteriormente.

Este tipo de información puede usarse en conjunto con los métodos de evaluación económica cubiertos en este capítulo para estimar precios de venta, tasas de retorno o algún parámetro que permita una rápida evaluación preliminar del potencial económico del proceso, o bien para comparar varias alternativas, detectar la o las de mejor potencial económico y desechar las de inferior potencial.

Ejemplo 2.3

Fenol, usado para fabricar resinas fenólicas como fenol-formaldehído, puede producirse a partir de cumeno, produciendo acetona como subproducto. A continuación, se dan los datos técnicos de esta tecnología.

Componente	Coeficiente T/T de producto
Acetona	0.61
Cumeno	−1.35
Fenol	1.00
Hidróxido de sodio	−0.01
Ácido sulfúrico	−0.01

Requerimientos de energía: 0.38 FOET/T
Inversión unitaria para una planta de 91 KT (1977\$): 490 \$/T

Estime el precio de venta del producto si se desea instalar una planta de 120,000 T/año, realizando los cálculos para 1980.

Datos de precios:

Cumeno: 16¢/lb
Acetona: 14 ¢/lb
Aceite combustible: 8 ¢/lb

Solución

La inversión del proceso debe primero ajustarse por efectos de tiempo y de capacidad. La inversión de la planta base es

$$I_b = 490 \text{ \$/T} \times 91{,}000 \text{ T} = \$\ 44.56 \times 10^6$$

Ajuste por capacidad. Usando la regla de los 6/10:

$$I = 44.59 \times 10^6 \left(\frac{120}{91}\right)^{0.6} = \$52.64 \times 10^6$$

Ajuste por tiempo. Usando los índices de construcción de plantas del *Chemical Engineering*:

$$I = 52.64 \times 10^6 \times \frac{261.2}{204.1} = \$67.4 \times 10^6$$

Para estimar el precio de venta, usemos el punto de equilibrio en el que el beneficio extra es igual a cero,

$$V = P - i_{min} I = 0$$

de donde el beneficio neto debe ser (suponiendo que $i_{min} = 0.2$):

$$P = i_{min} I = 0.2\ (64.7 \times 10^6) = 13.48 \times 10^6\ \$/\text{año}$$

A su vez,

$$P = R - e\,I - (R - d\,I)\,t$$

donde R = S – C, con lo cual se obtiene que las ventas son equivalentes a

$$S = \frac{P + C(1-t) + I(e - d\,I)}{1-t}$$

Se requiere ahora el cálculo del costo de operación. El costo de materias primas, tomando sólo en cuenta el costo de cumeno, es

$$C_{mp} = (16 \times 22)\ \$/T \times 1.35\ T/T\ prod = 457.2\ \$/T\ prod$$

lo cual es equivalente a 57×10^6 \$/año.

Se produce acetona como subproducto. Suponiendo que existe mercado para su venta, los ingresos serían

$$C_{sp} = (14 \times 22)\ \$/T \times 0.61\ T/T\ prod = 187.9\ \$/T\ prod$$

equivalente a 22.5×10^6 \$/año. El costo de energía se estima como

$$C_e = (8 \times 22)\ \$/FOET \times 0.38\ FOET/T\ prod = 66.88\ \$/T$$

que en forma anual resulta ser 8×10^6 \$/año.

Tomando otros costos como el 6 por ciento de la inversión, la estimación del costo de operación resulta ser

$$C = 0.06\ (67.4 \times 10^6) + (57 \times 10^6) + (8 \times 10^6) - (22.5 \times 10^6)$$
$$C = 46.5 \times 10^6\ \$/\text{año}$$

Sustituyendo en la expresión encontrada para S, suponiendo e = d = 0.1 y t = 0.5, obtenemos

$$S = 80.2 \times 10^6\ \$/\text{año}.$$

El precio unitario es entonces

$$p = \frac{S}{Q} = \frac{80.2 \times 10^6\ \$/año}{120{,}000\ T/año} = 668\frac{\$}{T}$$

o bien

$$p = 30.4\ ¢/lb$$

El enfoque de los cálculos presentados hasta este punto es general. Las estimaciones preliminares que se han mostrado no están ligadas a algún tipo de compañía en particular. Muchas compañías tienen ya preparadas sus hojas de cálculos donde se incluyen las partidas a contabilizar con sus respectivos porcentajes de ventas, de inversiones, o de algún otro concepto base. El siguiente ejemplo considera este tipo de enfoque, y muestra una forma alterna de estimar un precio de venta mediante la suma de los costos del proceso y de la utilidad esperada de acuerdo a una política supuesta de una compañía. Este tipo de estimaciones se basan en la operación de otros proyectos de esa compañía.

Ejemplo 2.4

Se está considerando la instalación de un proceso basado en un proyecto de investigación de una compañía. La inversión requerida se ha estimado en $30,000,000; el proceso tiene una capacidad de 130 KT/año. El capital de trabajo es de $3,000,000. A partir de los datos técnicos del proceso se han estimado los siguientes costos:

Materias primas	170 $/T
Servicios	5 $/T
Mano de obra	1 $/T

Estime el precio de venta del producto si la tasa de retorno o de recuperación antes de impuestos es de 30% y el proceso opera a capacidad completa. Suponga una vida del proyecto de 10 años.

Solución

El análisis de desarrolla en base unitaria. Estimemos primero los costos del proceso. Los costos de materias primas (C_1), energía (C_2) y mano de obra (C_3) son conocidos. Los costos adicionales que se consideran son depreciación, mantenimiento, abastecimientos, gastos administrativos, investigación y desarrollo, costos de ventas e impuestos y seguros.

Depreciación por unidad de producto:

$$C_4 = \frac{\$30,000,000}{(10)(130,000)} = 23.08\frac{\$}{T}$$

Costos de mantenimiento (@ 5% del capital fijo/año):

$$C_5 = \frac{(0.05)(\$30,000,000)}{(130,000\ T/año)} = 11.54\frac{\$}{T}$$

Abastecimientos (@ 15% de mantenimiento):

$$C_6 = 1.73\frac{\$}{T}$$

Gastos administrativos (@ 5% de las ventas):

$$C_7 = 0.05 \text{ p}$$

donde p es el precio del producto.
Investigación y desarrollo (@ 5% de las ventas):

$$C_8 = 0.05 \text{ p}$$

Costos de ventas (@ 10% de ventas):

$$C_9 = 0.10 \text{ p}$$

Impuestos y seguros (@ 3% de capital fijo/año):

$$C_{10} = \frac{(0.03)(\$30{,}000{,}000)}{130{,}000\ T/año} = 6.92\frac{\$}{T}$$

Los costos totales son la suma de los 10 costos individuales que se consideran:

$$\text{Costo total} = 219.27 + 0.2 \text{ p}$$

Para evaluar el precio de venta, debe agregarse al costo anterior la utilidad esperada del proceso. Con una tasa de retorno de 30% antes de impuestos, la utilidad esperada (antes de impuestos) es de

$$Utilidad = \frac{(0.3)(30{,}000{,}000 + 3{,}000{,}000)\ \$/año}{130{,}000\ T/año} = 76.15\frac{\$}{T}$$

Entonces, el precio de venta del producto es la suma de los costos más la utilidad:

$$\text{p} = 219.27 + 0.2 \text{ p} + 76.15$$

de donde,

$$\text{p} = 369 \text{ \$/T} = 16.8 \text{ ¢/lb}$$

Esta estimación del precio de venta debe compararse con el precio de mercado del producto. En caso de que no haya una buena competitividad esperada a este nivel, el proyecto debería cancelarse si no hay perspectivas de mejorar su eficiencia.

Un tratado inicial sobre principos de evaluación económica fue reportado en:

Rudd, D.F. y C.W. Watson, *Strategy of Process Engineering*, Wiley (1968).

Varios de los problemas propuestos al final del capítulo están basados en el catálogo de tecnologías publicado en

Rudd, D.F., S. Fathi-Afshar, M. Stadtherr y A.A. Treviño, *Petrochemical Technology Assessment*, Wiley (1981).

PROBLEMAS

En algunos de los problemas propuestos se sugiere algún año base para su solución. Esa base de tiempo puede adaptarse a la información disponible de costos que pudiera tenerse, diferente a la sugerida.

2.1 La regla de los 6/10 se usa para escalar el costo de un proceso por efecto de la capacidad total. Deduzca el correspondiente exponente de escalamiento para el caso en que se consideren inversiones unitarias en vez de inversiones totales.

2.2 Una planta química para producir propileno, con una capacidad de 50,000 T/año, requiere una inversión de 30 millones de dólares. Se desea instalar un proceso de 40,000 T/año de capacidad. El costo actual de materias primas es de 10 ¢/lb, y el costo de energía es de 3 ¢/lb. Si la compañía establece una tasa de retorno mínima de 20%, ¿cuál es la ganancia esperada del proceso, en ¢/lb de producto? Indique cualquier suposición que haga.

2.3 Una compañía quiere instalar un proceso de 100 KT de capacidad para producir óxido de etileno. Si la compañía opera bajo una tasa mínima de interés del 20 por ciento,

a) ¿Cuál es la ganancia esperada en ¢/lb?
b) ¿Cuál debe ser el precio del producto?

Información sobre la tecnología

- Materias primas

	Consumo	Precio
Etileno	0.88 T/T producto	21 ¢/lb
Oxígeno	1.1 T/T producto	2 ¢/lb

- Consumo de energía: equivalente a 1.8 \$/T producto
- Inversión necesaria para un proceso de 136 KT de capacidad: $\$58.5 \times 10^6$

2.4 Se desea instalar una planta de 40 KT de capacidad para producir cloruro de vinilideno. Haga un análisis económico de los siguientes dos procesos para decidir cuál es el más conveniente instalar.

- Proceso 1

  Balance de materia

Componente	Coeficiente T/T producto	Precio ¢/lb
Cloro	−0.92	7.0
Ácido clorhídrico	0.47	10.7
Tricloroetano	0.13	27.5
Cloruro de vinilo	−0.72	20.0
Cloruro de vinilideno	1.00	35.0

Costo de energía: $61.77/ton de producto.

Inversión fija para una planta de 23 KT: $\$20.93 \times 10^6$

- Proceso 2

  Balance de materia

Componente	Coeficiente T/T producto	Precio ¢/lb
Cloro	−3.01	7.0
Etano	−0.56	3.0
Cloruro de etilo	0.08	18.0
Ácido clorhídrico	2.11	10.7
Cloruro de vinilideno	1.00	35.0

Costo de energía: $109.42/Ton

Inversión fija para una planta de 23 KT: $\$25.3 \times 10^6$

Suponga una tasa mínima de retorno del 20%. Si necesita hacer otras suposiciones, indíquelas explícitamente.

2.5 Cumeno puede producirse a partir de benceno y propileno. Se desea instalar un proceso usando esta ruta a 100 KT de capacidad. Los datos de la tecnología se dan en seguida:

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T
Benceno	−0.67
Cumeno	1.00
Propileno	−0.38

Requerimientos de energía: 0.06 FOET/T

Inversión unitaria para un proceso de 127 KT de capacidad (1977$): 120 $/T.

Usando datos económicos de 1999,

a) Estime la ganancia del proceso después de impuestos, en ¢/lb, y
b) Estime el precio de venta del producto.

Suponga que el precio del aceite combustible es de 8 ¢/lb.
Suponga una tasa de retorno de 30%, y una vida del proceso de 10 años.

2.6 Una empresa industrial está considerando dos posibles alternativas de inversión:

A1) Instalar una planta de 136 KT de capacidad para producir ácido acético, que tiene un precio de venta de 20 ¢/lb.
A2) Instalar una planta de 345 KT de capacidad para producir amoniaco, que tiene un precio de venta de 15 ¢/lb.

Indique cuál alternativa sería recomendable elegir, si la compañía basa su decisión en:

a) la mayor tasa de retorno, o
b) el mayor beneficio extra.

Base su análisis en costos de 1990.
Datos adicionales para las tecnologías
Ácido acético

Consumo unitario de materias primas: 0.83 de n-butano.
Consumo de energía: equivalente a 1.6 ¢/lb de producto.
Inversión unitaria para una planta de 136 KT (1977$): 410 $/T

Amoniaco

Consumo unitario de materias primas: 0.42 de metano.
Consumo de energía: equivalente a 3.5 ¢/lb de producto.
Inversión unitaria para una planta de 345 KT (1977$): 230 $/T

Suponga los siguientes precios

n-butano: 4 ¢/lb Metano 4 ¢/lb

Índices económicos

$e = d = 0.1$ $t = 0.5$ $i_{mín} = 0.15$

Indique explícitamente cualquier suposición adicional que haga.

2.7 Se desea instalar un proceso para la producción de acetona a partir de isopropanol con una capacidad de 100 KT.

a) Estime la utilidad unitaria después de impuestos.
b) Estime el precio de venta del producto.

Base su análisis en datos de 1999.

Tecnología

Consumo unitario de materias primas:
1.11 de isopropanol
0.04 de nitrógeno

Consumo de energía:
0.33 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 68 KT (1977 $):
160 $/T

Precios

Suponga para nitrógeno 5 ¢/lb, y para aceite combustible 8 ¢/lb

Parámetros económicos

$e = d = 0.1 \quad t = 0.5 \quad i_{mín} = 0.15$

2.8 Se desea instalar una planta de 40 KT de cloruro de vinilideno. Basado en la información de las tres tecnologías que se reportan en seguida, detecte la alternativa que proporciona el menor costo de producción. Base su análisis en costos de 1996.

Tecnología 1

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T de producto
Cloro	−1.03
Etileno	−0.09
Dicloroetano	−0.83
Ácido clorhídrico	0.43
Hidróxido de sodio	−0.46
Cloruro de vinilideno	1.00

Costo de energía: $36/ton de producto

Inversión fija para una planta de 23 KT: $\$14.49 \times 10^6$ (1977$)

Tecnología 2

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T de producto
Cloro	−0.92
Ácido clorhídrico	0.47
Tricloroetano	0.13
Cloruro de vinilo	−0.72
Cloruro de vinilideno	1.00

Costo de energía: $61/ton de producto

Inversión fija para una planta de 23 KT: $\$20.93 \times 10^6$ (1977$)

Tecnología 3

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T de producto
Cloro	−3.01
Etano	−0.56
Cloruro de etilo	0.08
Ácido clorhídrico	2.11
Cloruro de vinilideno	1.00

Costo de energía: $109/ton de producto

Inversión fija para una planta de 23 KT: $\$25.3 \times 10^6$ (1977$)

Otros datos:

Depreciación 10%, Tasa de impuestos 50%
Tasa de retorno mínima 15%.
Se desea tener un mes de inventarios como capital de trabajo.
T = toneladas métricas.

Escriba cualquier suposición adicional que haga.

2.9 Se puede producir estireno por deshidrogenación de etilbenceno. Los datos técnicos para esta tecnología son los siguientes:

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T de producto
Benceno	0.05
Etilbenceno	−1.15
Estireno	1.00
Tolueno	0.05

Requerimientos primarios de energía: 0.32 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 454 KT (1977$) 190 $/T

a) Estimar el costo de producción de estireno en 1999.
b) Repita el inciso anterior suponiendo que la planta opera al 50% de su capacidad nominal.

Tome el costo de aceite combustible como 8 ¢/lb

2.10 Considere el proceso de producción de cumeno, cuyos datos técnicos se dan en el Ejemplo 2.3. Considerando el mismo escenario económico, calcule la tasa de retorno si el precio de venta del producto se fija en 33 ¢/lb y el proceso opera a un 80% de su capacidad nominal debido a limitaciones de mercado.

2.11 Anhídrido maléico, usado principalmente en la producción de poliésteres, puede producirse mediante la oxidación de benceno. En seguida se dan los datos técnicos de esta tecnología.

Componente	Coeficiente, T/T de producto
Benceno	−1.19
Anhídrido maléico	1.00

Consumo de energía 0.15 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 27,000 T (1977 $): 910 $/T

Un grupo industrial tiene interés en instalar una planta basada en esta tecnología, con una capacidad de 20,000 T. El análisis se desea basar en precios de 1999.

Si el precio de venta se fija en 55 ¢/lb, estime la tasa de retorno.

Tome el precio de aceite combustible como 8 ¢/lb.

2.12 Se han encontrado los siguientes datos para un proceso de producción de ciclohexano. La inversión requerida es de $510,000. El capital de trabajo es de $159,000. Los costos de operación son de 2,257,400 $/año, mientras que las ventas anuales son de $2,400,000. ¿Cuál es la tasa de retorno del proceso? Indique explícitamente cualquier suposición que haga.

2.13 Ácido tereftálico, usado para la producción de poliéster, puede producirse mediante oxidación con aire de p-xileno en presencia de un catalizador de cobalto-manganeso-bromo. Los siguientes son datos técnicos de esa tecnología.

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T de producto
Ácido acético	–0.06
Ácido tereftálico	1.00
p-xileno	–0.67

Requerimientos de energía: 0.34 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 150 KT (1977 $): 910 $/T

Se desea hacer un análisis de un proceso de 120 KT basado en costos de 1986.

(a) Si la planta opera a capacidad completa, estime el precio de venta del producto.
(b) Si el precio del producto se fija en 40 ¢/lb y el proceso opera a 75% de capacidad, estime la tasa de retorno.

2.14 Considere el proceso de disproporcionación de tolueno para producir benceno y xileno. Hengstebeck y Banchero estimaron una inversión en equipo principal de 3,742,000 dólares ($1969). Otros aspectos del proceso se dan a continuación. Los costos están en precios de 1969.

Costos de servicios, en miles de dólares por año:

Electricidad	322
Vapor	520
Combustible	333
Agua	30

Materiales, BCD (60°F)

Tolueno alimentado	3780
Productos	
Benceno	1590
Xileno	2000

H_2 alimentado, 10^6 SCFD	1.88
Aceite combustible, 10^6 Btu/día	1700

Notas: BCD = barriles por día
SCFD = pies cúbicos estándar/día

En base a los datos mostrados, estime

(a) El costo de operación del proceso.
(b) La rentabilidad del proceso. Interprete el resultado.
(c) La rentabilidad del proceso si éste opera al 70% de su capacidad nominal. Interprete el resultado.

Haga sus estimaciones usando precios de 1986.

2.15 Repita el problema anterior usando los datos que para esta tecnología reportan Rudd y colaboradores.

Componente	Coeficiente T/T producto
Benceno	1.00
Aceite combustible	0.01
Tolueno	−2.69
Xilenos	1.61

Consumo de energía 0.28 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 90 KT (1977$) 90 $/T

2.16 Considere ahora la producción de benceno mediante hidrodealkilación de tolueno. Los datos técnicos son los siguientes:

Componente	Coeficiente T/T producto
Benceno	1.00
Hidrógeno	−0.07
Metano	0.24
Tolueno	−1.20

Consumo de energía 0.08 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 90 KT (1977$) 60 $/T

Establezca una comparación del panorama económico de esta tecnología con respecto a la del problema anterior.

2.17 Para el caso de la tecnología de hidrodealkilación de tolueno del problema anterior, compare la tasa de retorno que se obtiene cuando el proceso opera al 50% de su capacidad con respecto a la esperada si el proceso opera a capacidad completa.

2.18 Se desea construir una planta de 15,000 toneladas por año de capacidad para producir ciclohexanol mediante oxidación de ciclohexano. A partir de la información técnica y económica que se proporciona, estime:

(a) El precio de venta de ciclohexanol en 1999.
(b) La utilidad del proceso, en ¢/lb.

Datos técnicos del proceso

Balance de materia

Componente	Coeficiente. T/T de producto
Ciclohexano	−1.64
Ciclohexanol	1.00

Ciclohexanona	0.38
Hidróxido de sodio	−0.13

Energía requerida como servicios: 0.43 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 23 KT de capacidad (1977 $): 550 $/T

2.19 El tereftalato de dimetilo puede producirse a partir de p-xileno. A continuación se dan los datos técnicos de esta tecnología.

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T
Tereftalato de dimetilo	1.00
Metanol	−0.41
p-xileno	−0.63

Consumo de energía: 0.32 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 150 KT (1977$) 820 $/T

Se desea evaluar la factibilidad de instalar una planta de 120 KT de capacidad para producir este compuesto. Base su análisis en datos de precios de 1996.

(a) Estime la tasa de retorno esperada para este proceso.
(b) Si la tasa mínima de retorno establecida por la compañía es de 0.15, calcule el beneficio extra. Interprete el resultado.

2.20 Para el caso de la tecnología para la producción de tereftalato de dimetilo presentada en el problema anterior, suponga que se considera la alternativa de adquirir una planta de 100 KT de capacidad, pero que la planta operará al 80% de su capacidad. Tomando los costos considerados en el problema anterior, estime la tasa de retorno que se espera.

2.21 Anhídrido maléico, usado principalmente en la producción de poliésteres, puede producirse mediante la oxidación de benceno. En seguida se dan los datos técnicos de esta tecnología.

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T de producto
Benceno	−1.19
Anhídrido maléico	1.00

Consumo de energía 0.15 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 27,000 T (1977 $): 910 $/T

Un grupo industrial tiene interés en instalar una planta basada en esta tecnología, con una capacidad de 20,000 T. El análisis se desea basar en precios de 1999.

Si el precio de venta se fija en 50 ¢/lb, estime la tasa de retorno.

2.22 Considere las tres tecnologías reportadas por Rudd et al. (*Petrochemical Technology Assessment*, John Wiley, 1981) para producir cloruro de vinilo.

a) Estime los precios de venta para cada tecnología suponiendo que cada proceso se opera a su capacidad nominal.
b) Estime los precios de venta para cada tecnología si cada proceso se opera a un nivel de producción de 150 KT/año.
c) Estime los precios de venta de cada tecnología basados en procesos de una capacidad nominal de 150 KT/año, y haciendo uso completo de esa capacidad.

Base su análisis económico en datos de 1999. Tome el precio del aceite combustible como 8 ¢/lb.

2.23 El copolímero cloruro de vinilo/acetato de vinilo puede producirse mediante un proceso de polimerización en suspensión. Los datos de la tecnología son los siguientes:

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T de producto
Acetato de vinilo	−0.19
Cloruro de vinilo	−0.88
Cloruro de vinilo/acetato de vinilo	1.00
Otras materias químicas	−0.02

Requerimientos de energía: 0.31 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 23 KT (1977 $) 830 $/T

Si se considera adquirir una planta basada en esta tecnología con una capacidad de 30 KT, estime el precio de venta del producto. Base su estimación a precios de 1986. De ser posible, compare su estimación con el precio de mercado y analice el resultado.

Datos adicionales

Precio de aceite combustible: 8 ¢/lb

Parámetros económicos

$e = d = 0.1$ $t = 0.5$ $i_{min} = 0.15$

2.24 Considere los siguientes datos técnicos para el proceso de producción de acrilamida mediante hidratación de acrilonitrilo:

Balance de materia

Componente	Coeficiente, T/T
Acrilamida	1.00
Acrilonitrilo	−0.76
Carbón activado	−0.02
Hidrógeno	−0.01

Requerimientos de energía: 0.38 FOET/T

Inversión unitaria para una planta de 14 KT (1977 $) 0.62 $1000/T

Calcule el precio de venta del producto en 1999 si el proceso opera al 90% de su capacidad nominal. ¿Cuál es la utilidad después de impuestos?

Suponga los siguientes precios:

Carbón activado 30 ¢/lb, hidrógeno 6 ¢/lb, aceite combustible 8 ¢/lb.

2.25 Suponga que para el escenario del Ejemplo 2.4, el precio del producto se fija en 15¢/lb. Estime la tasa de retorno que se espera bajo esta circunstancia. Suponga que no varía la política de la compañía en cuanto a sus gastos.

3

ESTIMACIÓN DE COSTOS DE INVERSIÓN

3.1 Método de Lang
3.2 Método de Guthrie

Cuando una tecnología es bien conocida, puede tenerse acceso a su costo de inversión a través de fuentes especializadas o del licenciador de la tecnología. Cuando el proceso está en desarrollo a escala laboratorio, sin embargo, esta estimación generalmente no está disponible. Es necesario en estos casos tener alguna estimación razonable del potencial económico del proceso en desarrollo, aun cuando esta estimación no sea completamente precisa. Una estimación aceptable en un momento dado puede servir para discriminar alternativas, o para evitar esfuerzos de tiempo y dinero en proyectos que no ofrezcan un buen potencial económico.

El nivel de precisión en las estimaciones de costos de inversión varía dependiendo del nivel de desarrollo del proyecto. La Tabla 3.1 muestra este aspecto; el nivel de precisión puede variar desde un 40% para una estimación preliminar hasta un 3% para una estimación detallada.

Tabla 3.1 Precisión de estimación de inversiones.

TIPOS DE ESTIMACIÓN	BASE GENERAL	PRECISIÓN PROBABLE %
Orden de magnitud	Información previa sobre costos similares	40
Estudio vía factores de estimación	Conocimiento de un diagrama de flujo	25
Estudio preliminar	Datos suficientes para la preparación de un presupuesto	12
Definitivo (control del proyecto)	Datos detallados, pero diagramas incompletos	6
Detallado (firma constructora)	Diagramas y especificaciones completas	3

Fuente: Pikulik y Díaz, "Cost Estimating for Major Process Equipment", *Chemical Engineering*, 107, (10 de octubre de 1977).

Aquí se tratarán algunos métodos que hacen uso de factores de estimación. En general, cualquier método de estimación requiere primero de un diagrama de flujo que muestre los principales componentes de equipos y sus dimensiones. El proceso de estimación tiene dos pasos generales:

a) la estimación del costo base de las unidades de equipo, y
b) el uso de factores de experiencia para incluir los accesorios adicionales para la operación de esos equipos de proceso.

3.1 Método de Lang

Este método clásico implica el sumar primero el costo base de los principales componentes del proceso,

$$I_e = \Sigma\, I_i$$

En seguida se multiplica I_e por una serie de factores de experiencia,

$$I_f = (I_e + (\Sigma\, f_i\, I_e))f_I$$

donde I_f es la estimación de la inversión completa del proceso, I_e es el costo de los principales equipos, f_i es un factor para la estimación del costo de tuberías, instrumentación, edificios, y f_I toma en cuenta los gastos indirectos tales como honorarios de ingenieros, contratistas, contingencias, etc.

Arreglando la ecuación anterior,

$$I_f = ((1 + \Sigma\, f_i)f_I)I_e \qquad (3.1)$$

o bien,

$$I_f = f_L\, I_e \qquad (3.2)$$

donde f_L es el factor de Lang,

$$f_L = (1 + \Sigma\, f_i)f_I \qquad (3.3)$$

Esta es una de las principales aportaciones del método de Lang, que implica que para estimar la inversión total de un proceso a partir del costo de sus equipos principales, se puede usar un factor global de experiencia. Típicamente, puede esperarse que el factor de Lang tenga valores entre 3 y 4 (ver Rudd y Watson, *Strategy of Process Engineering*, John Wiley, 1968), lo cual se desprende del análisis de varios procesos existentes (esto refleja que los costos de equipos, contrario a lo que tal vez pudiera esperarse, pueden representar en muchas ocasiones una fracción no muy considerable de la inversión total de una planta). Una buena experiencia del ingeniero de procesos, o una buena base de algún proceso similar, puede redundar en excelentes estimaciones de los factores de experiencia.

A continuación se dan valores del factor de Lang que se han reportado para cierto tipo de plantas:

Productos sólidos: 3.10
Mezclas de sólidos y fluidos: 3.63
Productos de fluidos: 4.74

3.2 MÉTODO DE GUTHRIE

Guthrie publicó en 1969 una de las mejores recopilaciones que se tengan sobre estimaciones de costos. Para el manejo de esta información, se divide la planta en módulos. Esta técnica se usa para estimar el costo de una unidad instalada o una planta instalada. La información del artículo se basó en datos de 42 proyectos de plantas de proceso. Aun cuando este tratado está basado en datos de costos de 1968, se expone en este capítulo por razones académicas, ya que su recopilación constituye un trabajo clásico en el área y su uso para estimación de inversiones ha sido notable. Varios trabajos en el área de síntesis de procesos, por ejemplo, han usado este método para sus evaluaciones económicas. Para una estimación actual de algún equipo en particular, se recomienda consultar la revista *Chemical Engineering*, donde se publican con frecuencia métodos de estimación de inversiones de diferentes tipos de equipos de proceso.

Aunque el trabajo de Guthrie incluye la posibilidad de estimar módulos como edificios, oficinas administrativas, terrenos y desarrollo del lugar, los módulos de equipo de proceso son los que representan el mayor interés y utilidad en nuestro caso y son los que se exponen en esta sección. Los módulos de equipo consisten de una combinación de varios elementos de costo, tales como:

— Costo de equipo (fob)
— Material directo
— Mano de obra directa en campo
— Costo directo de material y mano de obra
— Costos indirectos
— Costo del módulo desnudo
— Costo del módulo total

La estimación del costo de un módulo de equipo de proceso representa el costo de la construcción del equipo (intercambiador de calor, bomba, columna, etc.) y el costo de material, mano de obra e indirectos necesarios para instalar el equipo en un circuito de proceso químico.

El método comienza con la estimación de un costo base en función de alguna dimensión del equipo. Ese costo base implica acero al carbón como material de construcción, una geometría base del equipo, una presión de operación moderada y un año base de 1968. Ese costo debe corregirse luego al incorporar los datos de material de construcción, geometría, presión y año para la estimación del equipo deseado. Los costos base para varios equipos de procesos se muestran en las figuras 3.1 a 3.9. Para cada módulo, se incluyen las tablas que contienen las ecuaciones básicas de estimación de inversiones, así como los valores de los factores de ajuste respectivos.

Otra parte del ajuste implica el uso de factores de módulo, aplicables al costo base para luego corregir ese valor por el efecto de las características de la unidad deseada. Los factores de módulo se muestran en la Tabla 3.2. Notar que estos factores pueden verse conceptualmente como una especie de factores de Lang modificados.

Procedimiento

Guthrie presenta en su trabajo varios caminos alternativos cuyo punto final es la estimación del costo de un módulo del proceso. Una de las maneras más simples de procesar la información es la siguiente:

Tabla 3.2 Factores de módulos.

Unidad	Factor del módulo
Hornos de proceso	2.30
Calentadores de fuego directo	2.30
Intercambiadores de calor	3.39
Enfriadores de aire	2.54
Recipientes verticales	4.34
Recipientes horizontales	3.29
Bombas	3.48
Compresores	3.21

a) Obtener el costo base para una geometría base, acero al carbón y 1968, C_b.
b) Ajustar el costo base por efecto de la geometría requerida para el equipo y el material de construcción. Se obtiene el costo C_{fob}, que implica que no se incluyen costos de transporte y por la base de datos usados este costo se aplica al año 1968.
c) Para obtener el costo del módulo:

— usar el factor del módulo desnudo: $C_b \times \text{factor} = C_{md}$
— sumar diferencia entre la unidad deseada y la base:

$$C_{md} + (C_{fob} - C_b) = C_{mda}$$

— ajustar el costo hacia el año deseado usando índices de costos como los del *Chemical Engineering*
— añadir contingencias. Guthrie recomienda usar un factor de 15%:

$$C_{módulo} = 1.15\ C_{mda}$$

Como comentario adicional, cabe mencionar que en su artículo original, Guthrie recomienda otra forma de usar los índices de costos que no son consistentes con el concepto con el cual estos índices fueron desarrollados.

Ejemplo 3.1

Estimar el costo de un intercambiador de calor tipo Kettle en el año 2000, de 1,500 pies cuadrados de área, construido de acero inoxidable en los tubos y acero al carbón en la coraza (o carcasa), y que operará a 400 lb/pulgada cuadrada.

Solución

Estimemos primero el costo base de una unidad de 1,500 ft^2. De la Figura 3.3,

Costo base = $12,000

Los factores de ajuste para este caso son:

F_d = 1.35 (intercambiador tipo Kettle)
F_p = 0.25 (presión de trabajo de 400 psi)
F_m = 2.81 (material de construcción)

El costo ajustado es,

$$C_{fob} = 12{,}000\ (1.35 + 0.25)\ 2.81$$
$$C_{fob} = 53{,}952$$

Ahora, para intercambiadores de calor, el factor del módulo desnudo es (Tabla 3.2),

Factor del módulo = 3.39

El costo de una unidad en base acero al carbón, presiones moderadas, cabezal flotante y en 1968 es,

$$C_{md} = 12{,}000 \times 3.39 = 40{,}680$$

El costo de la unidad deseada se obtiene sumando al rubro anterior la diferencia entre C_{fob} y C_{base}, lo cual da lugar al costo del módulo desnudo ajustado,

$$C_{mda} = 40{,}680 + (53{,}952 - 12{,}000)$$
$$= 82{,}632$$

Este valor representa el costo de la unidad deseada en 1968, año base de la información usada. Para estimar el costo de la unidad en el año 2000, usemos los índices de costos de *Chemical Engineering* (Tabla 2.1).

Para 1968: 113.7
Para 2000: 394.1

Por lo tanto,

$$C_{mda} = 82{,}632 \times 394.1/113.7$$
$$= 286{,}414$$

Añadiendo 15 % de contingencias se obtiene el costo deseado,

Costo = $329,376

Este tipo de información se puede procesar para producir relaciones matemáticas con las que se puedan estimar los costos de diferentes unidades de proceso. Este enfoque se ha incorporado a algunos simuladores de procesos que ofrecen la posibilidad de estimación de costos.

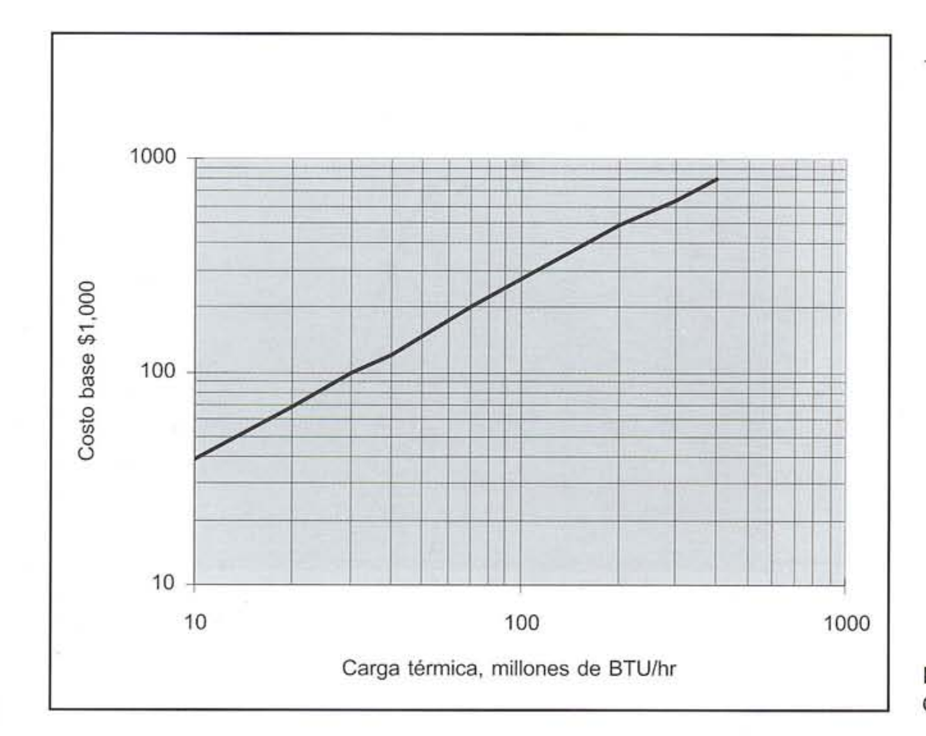


FIGURA 3.1
Costo base para hornos de proceso.

HORNOS DE PROCESO

Costo de un horno de proceso, $ = [costo base(Fd + Fm + Fp)]
Costo de horno reformador o de pirólisis, $ = [costo base(Fd + Fp)]

Factores de ajuste

Tipo de diseño	Fd	Material de la tubería	Fm	Presión de diseño (psi)	Fp
Calentador	1.00	Acero al carbón	0.00	Inferior a 500	0.00
Pirólisis	1.10	Cromo/molibdeno	0.35	1000	0.10
Reformador (sin catalizador)	1.35	Inoxidable	0.75	1500	0.15
				2000	0.25
				2500	0.40
				3000	0.60

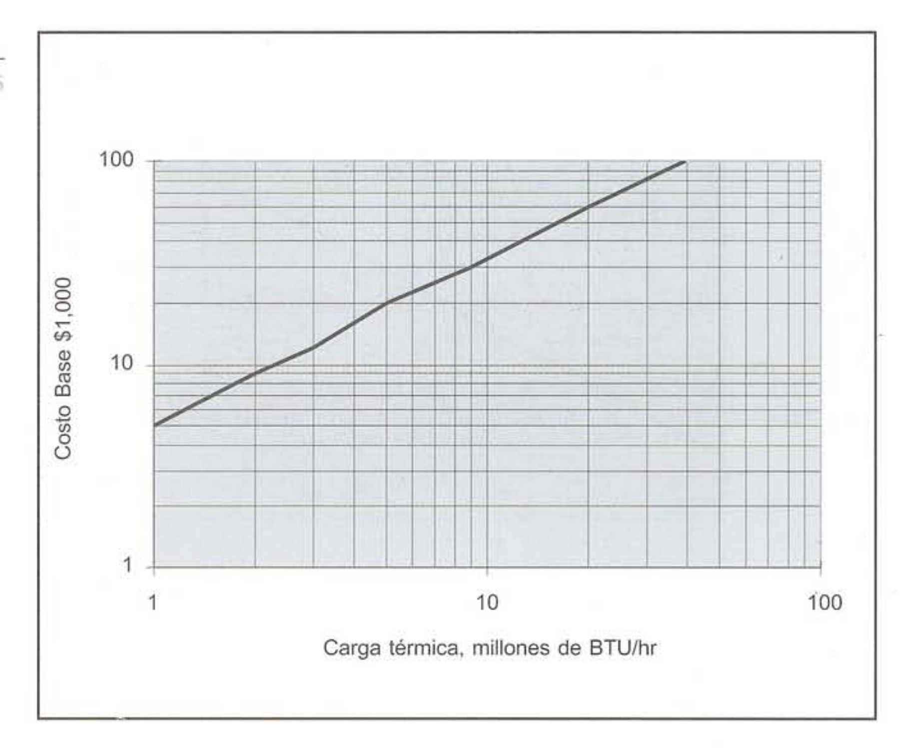


FIGURA 3.2
Costo base para calentadores de fuego directo.

CALENTADORES A FUEGO DIRECTO

Costo del calentador a fuego directo	$ = [costo base(Fd + Fm + Fp)]

Factores de ajuste

Tipo de diseño	Fd	Material de la tubería	Fm	Presión de diseño (psi)	Fp
Cilíndrico	1.00	Acero al carbón	0.00	Inferior a 500	0.00
Dowtherm	1.33	Cromo/molibdeno	0.45	1000	0.15
		Acero inoxidable	0.50	1500	0.20

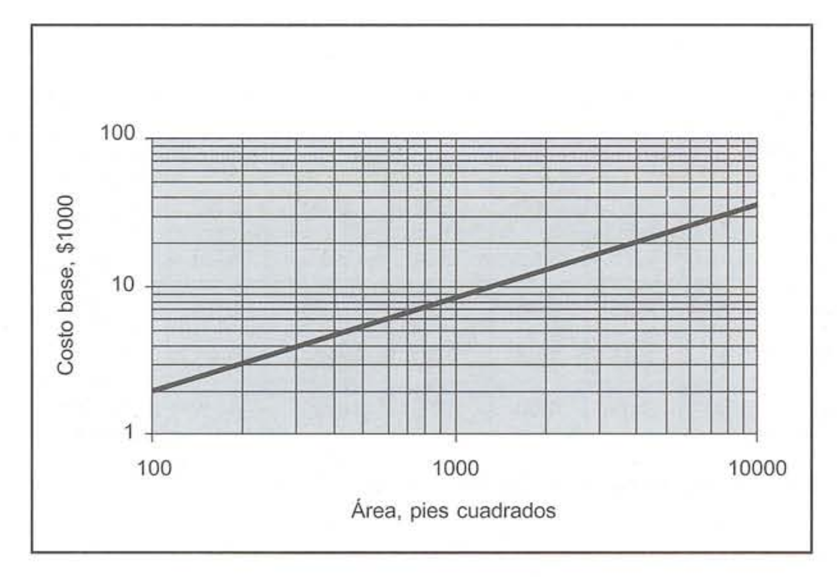


FIGURA 3.3
Costo base de intercambiadores de calor.

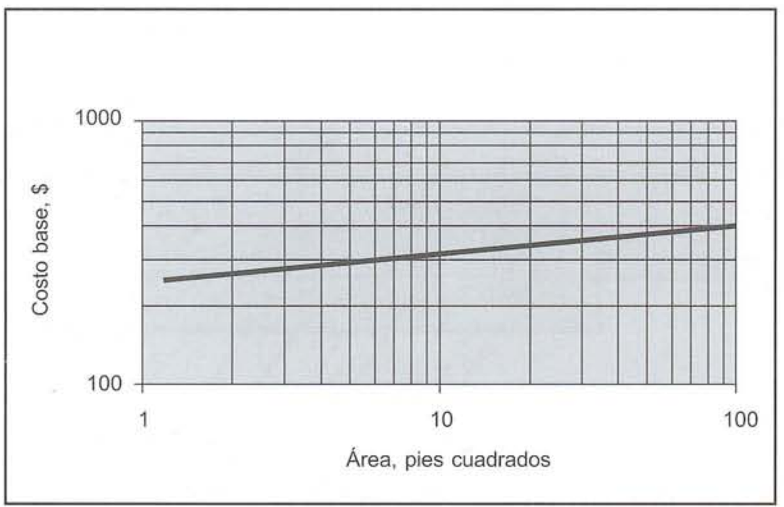


FIGURA 3.4
Costo de intercambiadores de calor (áreas pequeñas).

INTERCAMBIADORES DE CALOR

Costo del intercambiador	$ = [costo base (Fd + Fp) * Fm]

Factores de ajuste

Tipo de diseño	Fd	Presión de diseño (psi)	Fp
Reboiler, Kettle	1.35	Inferior a 150	0.00
Cabezal flotante	1.00	300	0.10
Tubo U	0.85	400	0.25
Hoja de tubos fijos	0.80	800	0.52
		1000	0.55

Material de la coraza / tubo, Fm

Área, ft^2	AC/ AC	AC/ Latón	AC/ Mo	AC/ Al	Al/ Al	AC/ Monel	Monel/ Monel	AC/ Ti	Ti/Ti
Inf. a 100	1.00	1.05	1.60	1.54	2.50	2.00	3.20	4.10	10.28
100 a 500	1.00	1.10	1.75	1.78	3.10	2.30	3.50	5.20	10.60
500 a 1000	1.00	1.15	1.82	2.25	3.26	2.50	3.65	6.15	10.75
1000 a 5000	1.00	1.30	2.15	2.81	3.75	3.10	4.25	8.95	13.05
5000 a 10000	1.00	1.52	2.50	3.52	4.50	3.75	4.95	11.1	16.60

INTERCAMBIADORES DE DOBLE TUBO

Costo de intercambiadores de doble tubo (para procesos con requerimientos menores a 100 ft^2 con especificación de unidades de doble tubo).

Factores de ajuste

Material	Fm	Presión (psi)	Fp
AC/AC	1.00	Inferior a 600	1.00
AC/Al	1.85	900	1.10
		1000	1.25

Factores de módulo

Instalación de campo	1.35
Factor de módulo (normalizado)	1.83

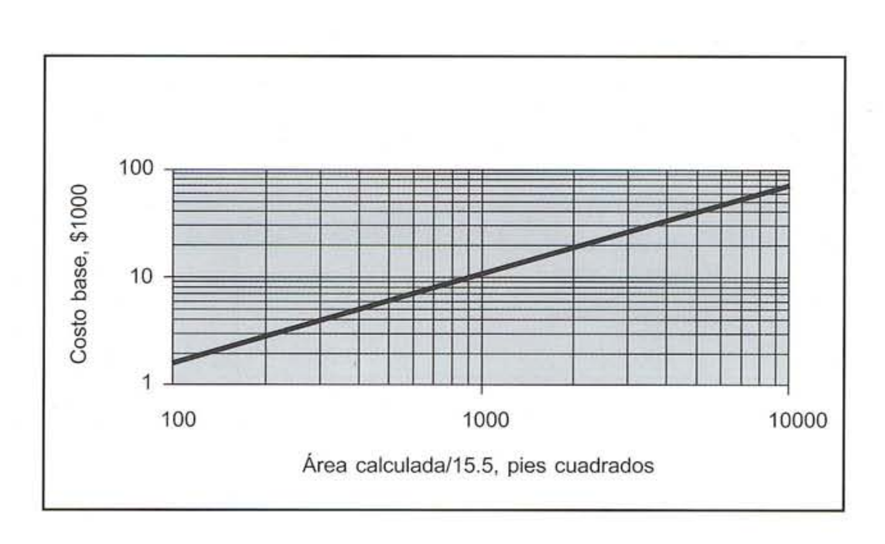


FIGURA 3.5
Costo de enfriadores de aire.

ENFRIADORES DE AIRE

Costo de un enfriador	$ = [costo base (Fp + Ft + Fm)]

Factores de ajuste

Presión (psi)	Fp	Longitud de tubo (ft)	Ft	Material del tubo	Fm
150	1.00	16	0.00	acero al carbón	0.00
250	1.05	20	0.05	aluminio	0.50
500	1.10	24	0.10	acero inoxidable	1.85
1000	1.15	30	0.15	monel	2.20

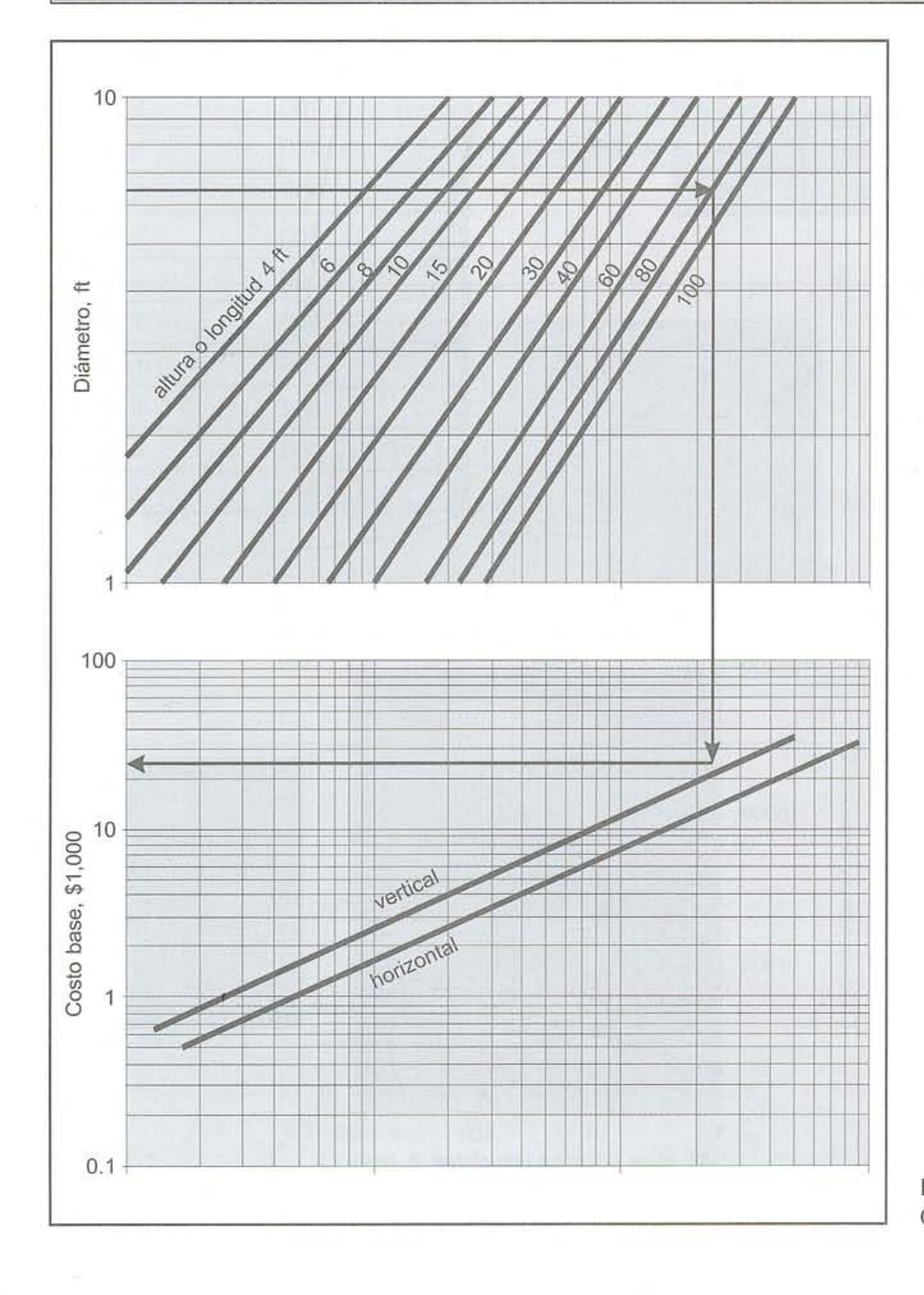


FIGURA 3.6
Costo base de recipientes de proceso.

Para encontrar el costo del recipiente, se usa primero la gráfica superior utilizando el diámetro y la altura o longitud del recipiente para obtener el valor de la abscisa, y con este valor se usa la segunda gráfica para obtener el costo con la curva correspondiente a recipientes horizontales o verticales.

RECIPIENTES DE PROCESO

Costo de recipientes de proceso	$ = [costo base * Fm * Fp]

Factores de ajuste

Material de recubrimiento	Fm revestido	Fm sólido
Acero al carbón	1.00	1.00
Inoxidable 316	2.25	3.67
Monel	3.89	6.34
Titanio	4.23	7.89

Factor de presión (Psi)	Fp
Hasta 50	1.00
100	1.05
200	1.15
300	1.20
400	1.35
500	1.45
600	1.60
700	1.80
800	1.90
900	2.30
1000	2.50

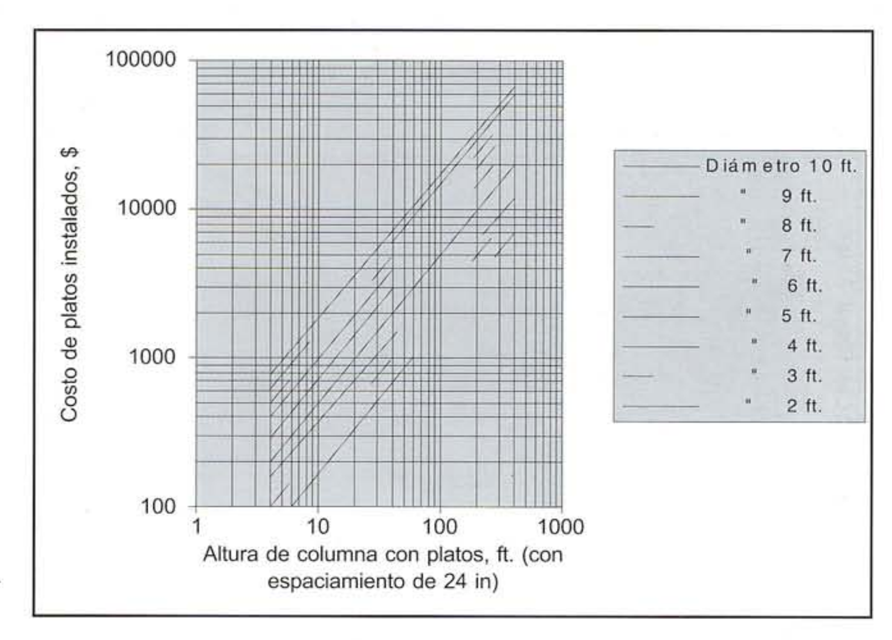


FIGURA 3.7
Costo de platos para columnas de destilación.

Platos

Costo de platos, $ = [costo base (Fs + Ft + Fm)]

Factores de ajuste

Espaciamiento entre platos (pulg)	Fs	Tipo de plato	Ft	Material del plato	Fm
24	1.0	Rejilla (sin rebasadero)	0.0	Acero al carbón	0.0
18	1.4	Sieve	0.0	Acero inoxidable	1.7
12	2.2	Válvula	0.4	Monel	8.9
		Campana de burbujeo	1.8		
		Cascada de Koch	3.9		

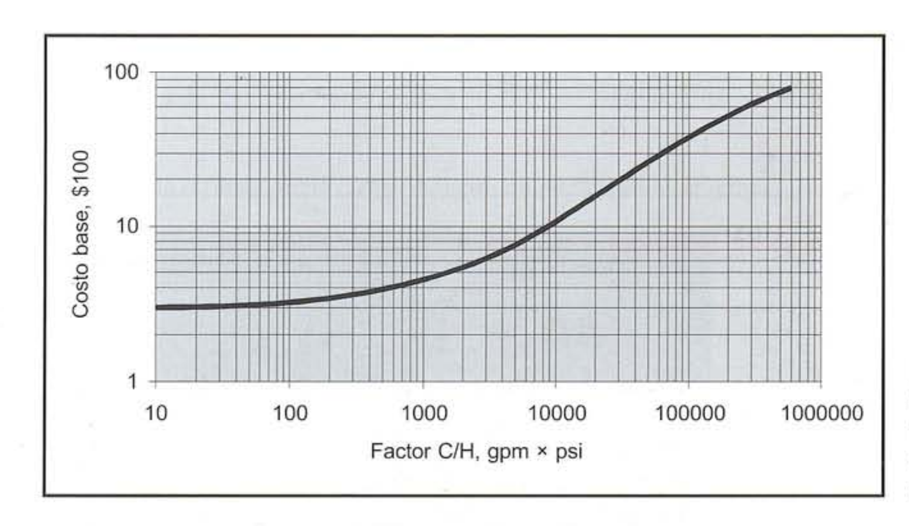


FIGURA 3.8
Costo base de bombas centrífugas. El factor C/H se refiere al producto de la capacidad en gpm por la carga dinámica total en psi.

BOMBAS CENTRÍFUGAS

Costo de bombas centrífugas, $ = [costo base * Fm * Fo]

Factores de ajuste

Material	Fm
Hierro moldeado	1.00
Bronce	1.28
Acero colado	1.32
Acero inoxidable	1.93
Carpenter 20	2.10
Worthite	2.44
Hastelloy C	2.89
Monel	3.23
Níquel	3.48
Titanio	8.98

Limites de operación	Valor máximo		
Presión de succión, psig	150	500	1000
Temperatura del sistema, °F	250	550	850
Factor Fo	1.0	1.5	1.9

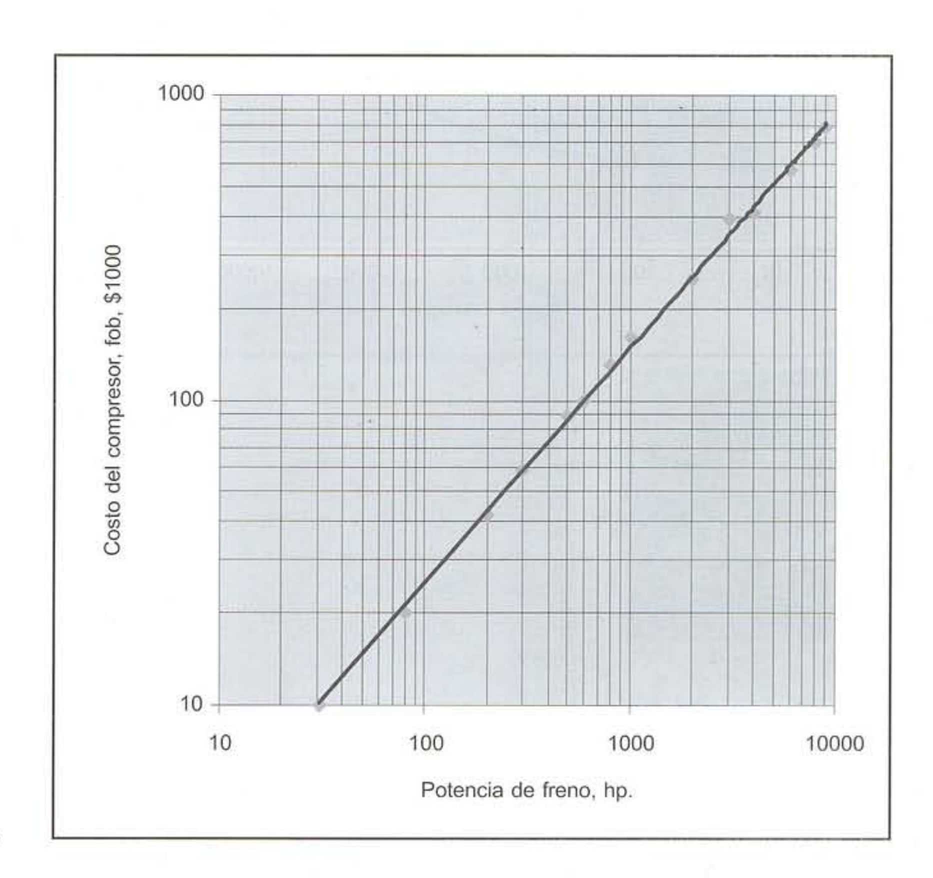


FIGURA 3.9
Costo base de compresores de gases.

Costo de compresor, $ = [costo base * Fd]

Tipo de diseño	Fd
Centrífuga / motor	1.00
Alternativo / vapor *	1.07
Centrífuga / turbina *	1.15
Alternativo / motor *	1.29
Alternativo / máquina de gas *	1.82

* Incluyen recipientes de etapas internas y ventiladores pero no empaques u otras divisiones de flujos.

REFERENCIAS

Para mayores detalles del método de Lang puede consultarse:

Rudd, D.F. y C.W. Watson, *Strategies in Process Engineering*, John Wiley (1968).

El método de estimación de costos cubierto en este capítulo se publicó en:

Guthrie, K.M., Capital Cost Estimation, *Chemical Engineering*, p. 114, 24 de marzo de 1969.

PROBLEMAS

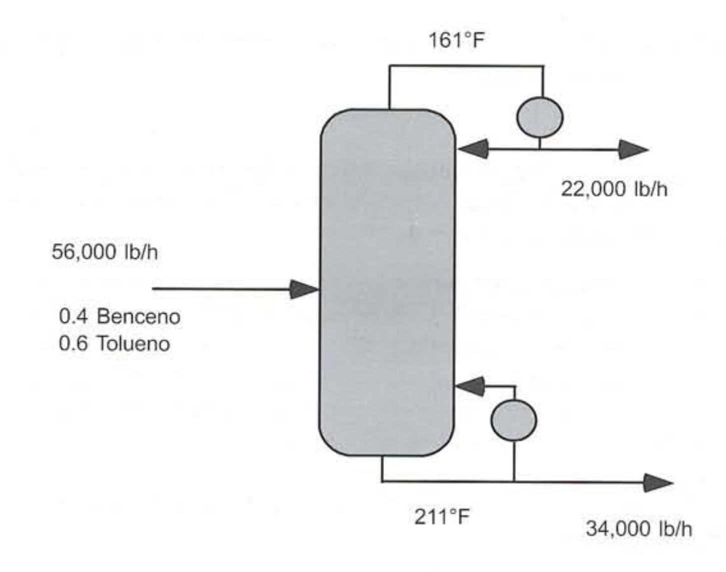
3.1 Estime el costo en 1998 de un horno de proceso que procesa 150 millones de Btu/hr, construido de acero inoxidable y que opera a 2,200 psi. Indique explícitamente cualquier suposición adicional que haga.

3.2 Considere el sistema mostrado en la figura de la página 52.

a) Estime el costo de instalación de los tres equipos principales en el año 2000 usando el método de Guthrie.
b) Estime el costo de operación del sistema. Suponga 8,500 horas de operación al año y los siguientes costos de servicios para ese año:

Costo de vapor:	$1.00 por millón de Btu
Agua de enfriamiento:	$0.40 por millón de Btu

Carga térmica del condensador: 8.7×10^6 Btu/hr
Agua de enfriamiento: $T_{ent} = 80°F$, $T_{sal} = 110°F$



Datos adicionales:

Torre de destilación
7 ft diámetro
15 platos con 2 ft espaciamiento

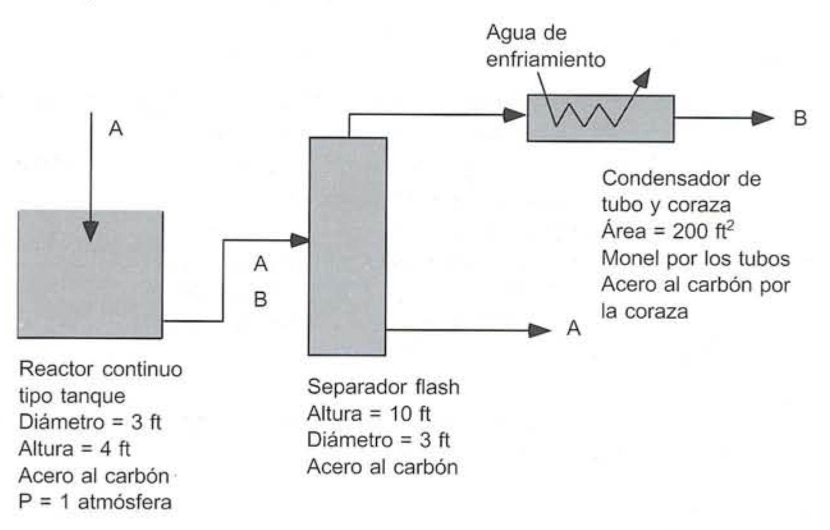
Hervidor
Área 2,000 ft^2
Carga térmica 9.5×10^6 Btu/hr

Suponer un coeficiente global de transferencia de calor para el condensador y el hervidor de 200 Btu/hr ft^2 °F.

3.3 Se está considerando el proceso que se muestra en la figura. En el reactor se lleva a cabo la reacción

$$A \rightarrow B$$

El sistema de separación produce una corriente de alta concentración de B para venderse.

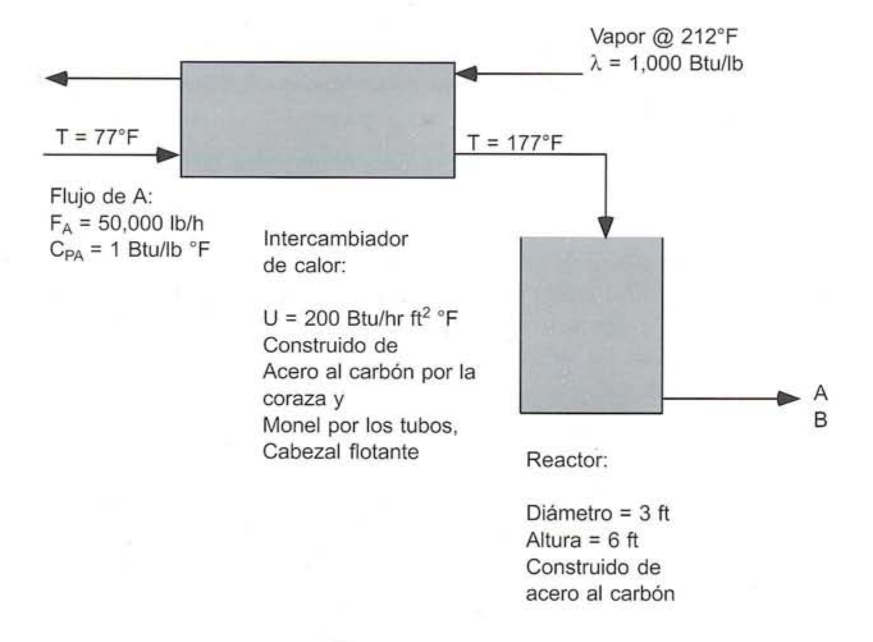


Estime la inversión de los tres equipos de proceso usando el método de Guthrie. Base sus estimaciones a 1999.

3.4 Para el proceso mostrado en el problema 3.3, un grupo externo ha estimado que la inversión actual equivale a 1 millón de dólares. La capacidad del proceso es de 1 KT/año, y se consumen 1.1 T de A por cada T de B. El precio de B en el mercado es de 35 ¢/lb.

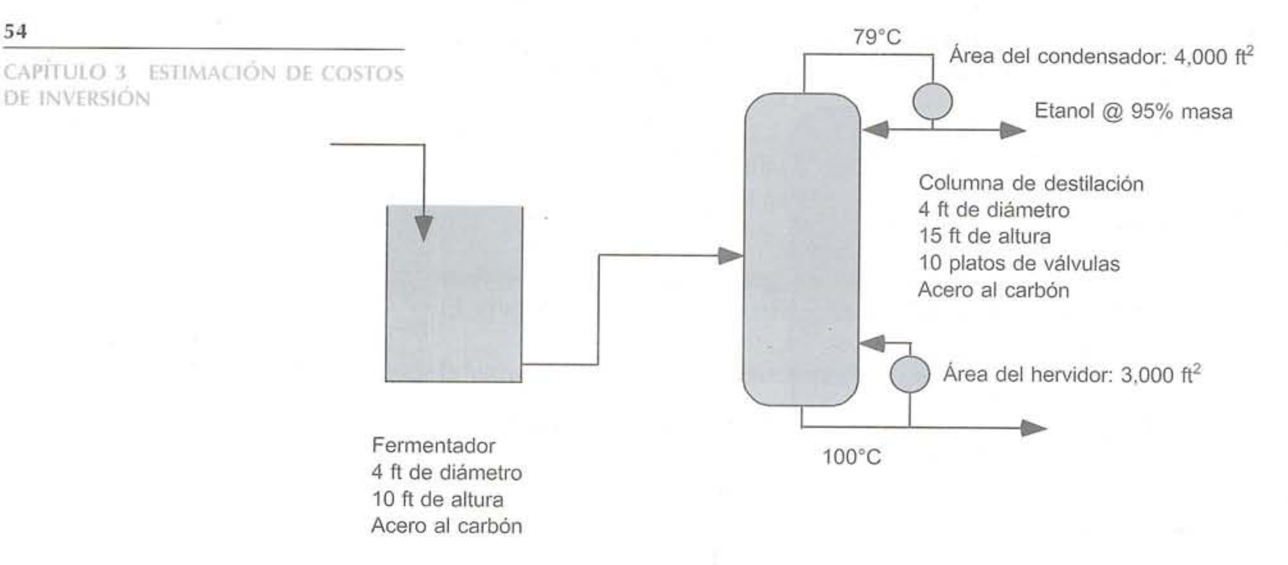
En el condensador, la temperatura de entrada del agua de enfriamiento es de 25°C y la de salida de 40°C. El calor latente de B es de 1,000 Btu/lb. El costo del agua de enfriamiento es de 5×10^{-4} $/lb.
Se está negociando el precio de la materia prima A. ¿Cuál debe ser el precio máximo de A que la compañía puede pagar para que el proceso sea rentable? Use parámetros económicos típicos.

3.5 Se desea estimar la inversión requerida para la siguiente parte de un proceso en desarrollo.



(a) Estime la inversión requerida para cada uno de los equipos usando el método de Guthrie. Base su estimación para 1998.
(b) Calcule el costo anual de vapor para este esquema si su costo unitario es de 1 ¢/lb y se trabajan 8,500 horas al año.
(c) Si la corriente de salida del reactor se desea vender, y se desprecia el precio de la materia prima, estime el precio de venta si se desea una tasa mínima de recuperación después de impuestos del 15%. Suponga que la producción de la mezcla a vender es equivalente a 2,000,000 lb/año.

3.6 El diagrama de flujo que se muestra representa una alternativa para producir etanol mediante fermentación:

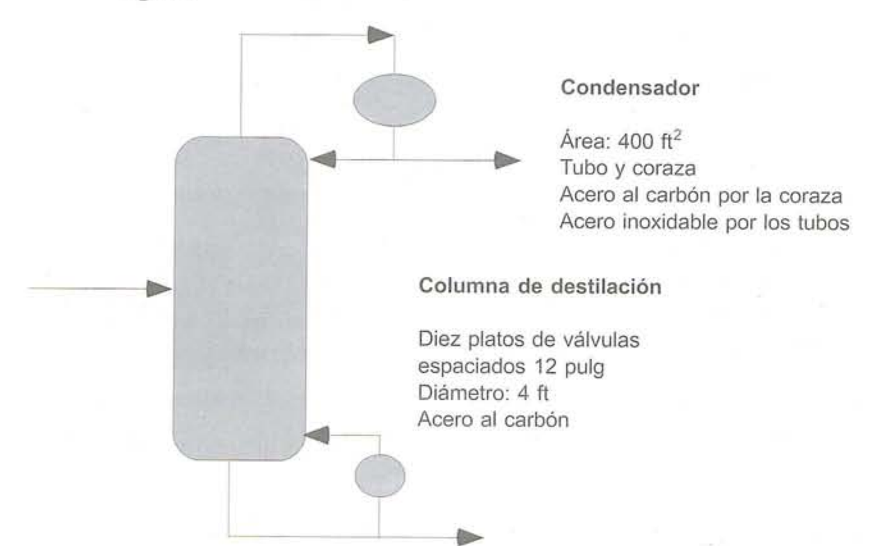


La producción deseada de la corriente de etanol es de 100×10^6 lb/año. La concentración de etanol a la salida del fermentador es de 150 g/L. Para fines de estimación preliminar se puede suponer que la corriente de salida del fermentador es una mezcla de etanol y agua.

a) Usando el método de Guthrie, estime la inversión de los principales componentes del proceso (fermentador, columna, condensador y calderín). Refiera su estimación para 1990.
b) Estime el precio de venta del producto. El costo de materias primas puede tomarse como el costo del sustrato, que equivale a 20 ¢/lb. El costo de vapor es de 1×10^{-2} \$/lb y el de agua de enfriamiento 5×10^{-4} \$/lb. La columna de destilación opera a una razón de reflujo de 4 (en base másica).

Indique explícitamente cualquier suposición que haga.

3.7 Considere la columna de destilación con los datos que se muestran en la figura.



La columna se operará a presión atmosférica. Se desea hacer una estimación preliminar de la inversión que requiere el sistema en 1995.

(a) Estime la inversión requerida para el condensador.
(b) Estime la inversión requerida para la columna.

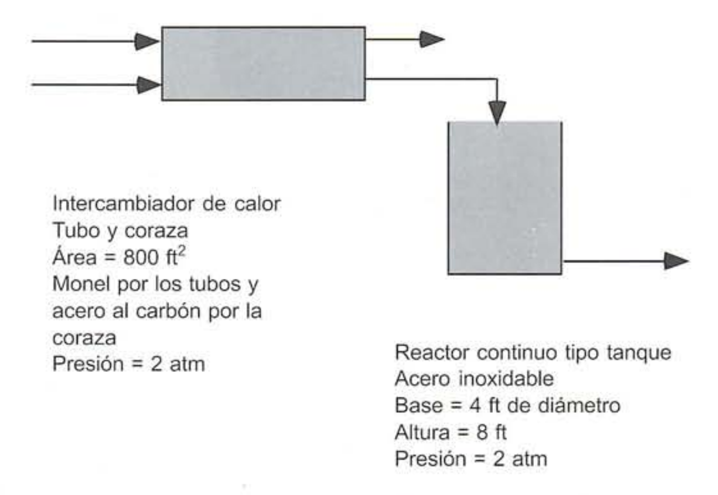
3.8 Una columna de destilación procesa 12,000 lb/hr de una solución acuosa que contiene 5% de amoniaco en peso, y produce un flujo de destilado de 3,000 lb/hr con una concentración de 20%en peso. Estime la inversión total requerida para los tres componentes de equipo en 1997. Indique explícitamente cualquier suposición que haga.

Datos de la columna:
Diámetro = 3.5 ft; altura = 8 ft; con 5 platos de cachucha (o campanas) con espaciamiento de 1 ft, y de acero al carbón.

Datos del hervidor:
Área = 200 ft^2, tipo kettle, acero inoxidable por los tubos y acero al carbón por la coraza.

Datos del condensador:
Área = 2000 ft^2, tubo y coraza, monel por los tubos y acero al carbón por la coraza.

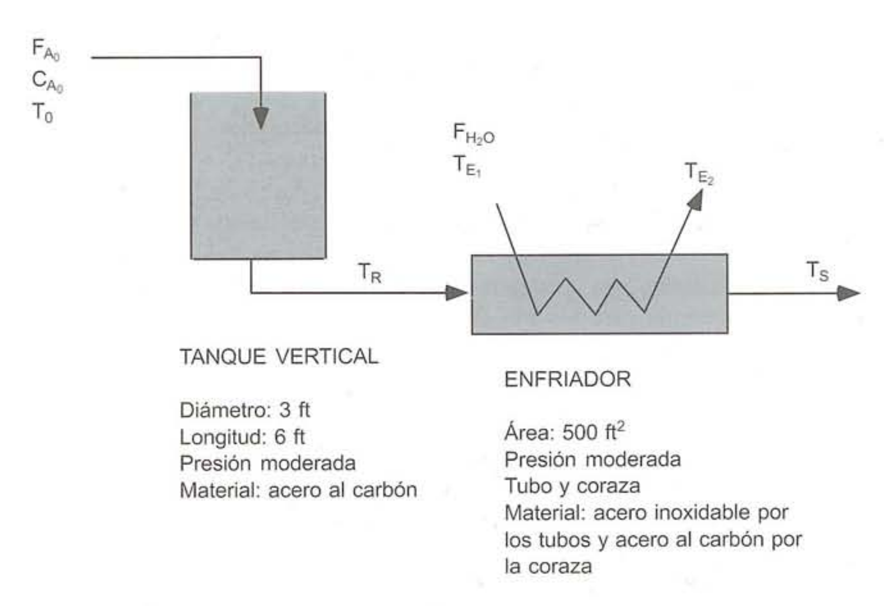
3.9 Considere el diagrama de flujo que se muestra en seguida. Estime la inversión requerida para este proceso para el año 2000 usando el método de Guthrie.



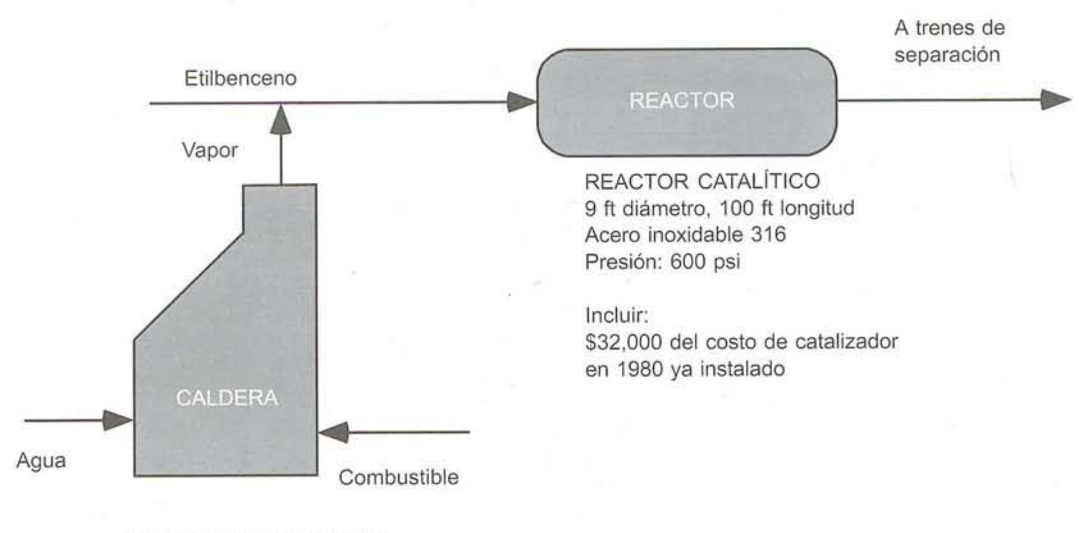
3.10 Calcular mediante el método de Guthrie el costo en 1990 de un intercambiador de calor de cabezal flotante con un área de 1,000 ft^2 que va a operar a presiones moderadas, construido de acero al carbón por la coraza y monel por los tubos.

3.11 Considere el sistema tanque-enfriador mostrado en la figura. Estime la inversión que este proceso requería en 1968 de acuerdo al método de Guthrie.

3.12 La deshidrogenación de etilbenceno se realiza a 600°C con la adición de



vapor a altas temperaturas. Estime la inversión necesaria para el generador de vapor y el reactor usando el método de Guthrie. Haga sus estimaciones para 1980.



Parte II

Optimización

4

SELECCIÓN DE VARIABLES DE DISEÑO

4.1 Modelación de procesos
4.2 El concepto de grados de libertad
4.3 Algoritmo de Lee y Rudd

Para fines de análisis y diseño de procesos es necesario entender la dependencia que guardan entre sí las diferentes variables involucradas. Este aspecto no es trivial, y una manera muy conveniente de explorar esos efectos es comenzar por establecer un modelo matemático del sistema. Revisamos en este capítulo algunos conceptos sobre modelación de sistemas. Se presenta también un algoritmo para la especificación de la secuencia de cálculo en la solución de sistemas de ecuaciones y para la selección de las mejores variables de diseño.

4.1 Modelación de procesos

El modelo matemático de un proceso consiste en una serie de relaciones que se establecen para cada equipo que forma parte del sistema. Podemos establecer que en general para cada equipo un modelo consiste de una combinación de las siguientes expresiones:

- Balance de cantidad de movimiento
- Balance de materia
- Balance de energía
- Ecuaciones de diseño
- Relaciones termodinámicas y ecuaciones cinéticas
- Especificación de algunas variables o restricciones particulares

El primer tipo de balances no es de importancia para muchos equipos de proceso, tales como sistemas de reacción y de separación. Por su parte, las ecuaciones básicas de balances de materia y de energía se establecen en estado estable para fines de diseño, o en estado no estacionario o transiente para fines de estudios dinámicos y de control. Siendo el primer aspecto el de interés en este libro, los balances necesarios para el análisis y diseño de procesos se establecen en estado estable.

El modelo resultante consiste típicamente de un sistema de ecuaciones acopladas y no lineales, cuya solución puede ser directa para un equipo simple, o bastante complicada para un proceso completo; este último hecho ha dado origen al desarrollo de simuladores de proceso por computadora, los cuales esencialmente se encargan de resolver las ecuaciones que modelan el sistema en estado estable mediante alguna técnica numérica, acoplada en ocasiones a una estrategia de descomposición del sistema original de ecuaciones.

En muchas ocasiones, la solución numérica del modelo del proceso requiere de procedimientos iterativos para su solución; en estos casos es importante seleccionar adecuadamente las variables que deben suponerse (variables de diseño) con el fin de hacer más eficiente la solución del problema.

4.2 El concepto de grados de libertad

Para el análisis y diseño de procesos se requiere de modelos que describan el comportamiento de esos sistemas. Estos modelos que gobiernan el sistema consisten de M ecuaciones independientes que involucran N variables. Se pueden visualizar tres casos:

a) $M > N$. En este caso el sistema está sobreespecificado y no tiene solución. Debe revisarse la modelación del sistema.
b) $M = N$. El sistema está completamente definido y tiene solución. Si el sistema es lineal, la solución es única; si el sistema es no lineal, pueden existir soluciones múltiples para el problema en cuestión.
c) $M < N$. Con objeto de definir el sistema se necesitan $N - M$ relaciones adicionales, que pueden ser en forma de valores establecidos de algunas variables de diseño. Se dice en estos casos que el sistema tiene F grados de libertad, dados por

$$F = N - M \tag{4.1}$$

Esta situación conduce a un típico problema de optimización. El ajuste de esas variables dadas por los grados de libertad deberá hacerse de acuerdo a una función objetivo que se establece. Se requiere entonces de técnicas de optimización para la solución de este tipo de problemas.

Ejemplo 4.1

Considérese el caso simple de un tanque de mezclado como el mostrado en la Figura 4.1. Examinemos de este problema las posiblidades de tener cada uno de los casos descritos anteriormente.

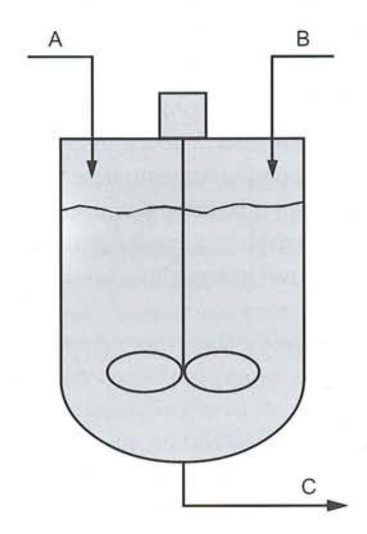


FIGURA 4.1
Sistema de tanque de mezclado.

Caso I

Supongamos que se escriben las siguientes relaciones para modelar el sistema:

Balance de Materia:

$$A + B = C \tag{4.2}$$

Especificación de diseño:

$$K = B/A \tag{4.3}$$

Restricciones:

$A = 1000$ (4.4)

$C = 2000$ (4.5)

$K = 4.0$ (4.6)

Se tienen en este caso cinco relaciones independientes y sólo cuatro variables. El problema está sobreespecificado, y por lo tanto no tiene solución. Esto proviene de una mala modelación del sistema, y se requiere eliminar al menos una de las tres últimas ecuaciones que se han estipulado en forma de restricciones.

Caso II

Supongamos que se elimina la penúltima restricción de la modelación anterior, dejando por lo tanto el valor de C sin especificar. Entonces el número de ecuaciones se reduce a cuatro, con el mismo número de variables originales. El sistema puede resolverse y encontrar una solución única. Al hacerlo, se obtiene que el valor de las dos variables desconocidas son $B = 4000$ y $C = 5000$.

Caso III

Supongamos ahora que se elimina, adicionalmente al caso anterior, la última restricción del problema, quedando K por conocerse. Esto arroja un sistema con cuatro variables y tres ecuaciones, lo cual implica que se tiene un grado de libertad. Existe por lo tanto un número sin límite de posibles soluciones, es decir un número infinito de combinaciones de valores de B, C y K que satisfacen las tres ecuaciones que modelan el sistema. Esto representa la mayoría de las situaciones que aparecen en el análisis y diseño de procesos, y la selección de los valores que en particular se fijan para la operación del sistema está ligada a algún tipo de objetivo o comportamiento deseado. En particular, para problemas formales de optimización, esa selección está ligada a una función objetivo que se establece tratando de maximizar algún tipo de salidas o beneficios, o de minimizar algún tipo de entradas o costos del sistema.

4.3 Algoritmo de Lee y Rudd

Para problemas cuya modelación arroja grados de libertad positivos, situación que representa la inmensa mayoría de casos en el campo de la ingeniería química, dos aspectos son de importancia:

a) la manera en que se van a satisfacer esos grados de libertad, lo cual implica seleccionar las variables de diseño que se requieren para poder resolver el problema, y
b) la forma en que se va a resolver el sistema de ecuaciones resultante. Para este punto es muchas veces conveniente establecer el orden en

el cual esas ecuaciones deben resolverse con objeto de minimizar los problemas numéricos en el proceso de solución.

Para satisfacer los grados de libertad, se tienen dos aspectos. Primero se puede establecer el valor de algunas variables de acuerdo a estipulaciones establecidas, generalmente por alguna conveniencia, por ejemplo que estén contenidas en ecuaciones cuya solución sea muy difícil para obtener esas variables. Las demás variables que se requiere estipular deben entonces de seleccionarse de tal manera que se facilite la solución del sistema de ecuaciones resultante. Presentamos ahora el algoritmo de Lee y Rudd, el cual provee una herramienta muy útil para facilitar la selección de variables de diseño.

Se construye primero una matriz de incidencia, la cual consiste en formar un arreglo con renglones (o filas) que especifican las ecuaciones y columnas que identifican las variables contenidas en el sistema de ecuaciones. Se detecta la presencia de una variable en una ecuación mediante algún identificador en ese elemento de la matriz, por ejemplo una X. Si la variable en cuestión no está contenida en la ecuación, se tiene la ausencia de ese identificador.

En seguida se detecta alguna columna que contenga una sola X, lo cual representa que esa variable aparece únicamente en esa ecuación; se elimina esa columna (variable) y su correspondiente renglón (ecuación) y se repite el procedimiento con el sistema de ecuaciones reducido. Eventualmente, todas las ecuaciones se eliminan y las columnas que quedaron sin eliminar representan las mejores variables de diseño para ese problema. La solución entonces está dada por el proceso inverso al de eliminación, o sea que la primera ecuación en eliminarse es la última en resolverse. Si el proceso de eliminación se cumple habiendo en cada paso una columna con un solo elemento de incidencia, significa que la solución del sistema de ecuaciones es secuencial y no requiere de la solución simultánea de algún subconjunto de ecuaciones o de soluciones mediante ensayo y error. El número de columnas sin eliminar en estos casos es igual al número de grados de libertad del problema.

¿Qué hacer cuando se llegue a una situación donde existan sólo columnas con más de una incidencia? Por un lado implica que la solución al sistema de ecuaciones ya no es puramente secuencial. Se deben eliminar tantos renglones como sea necesario para generar al menos una columna con una incidencia y aplicar el procedimiento descrito anteriormente. Al final del proceso quedarán sin eliminar un número de columnas igual a los grados de libertad del sistema más el número de ecuaciones que se eliminaron para generar columnas con una incidencia en la etapa intermedia. Se eligen en esos casos un número de variables de diseño equivalentes a los grados de libertad del sistema, y el resto se identifican como variables de reciclo, lo cual implica que es necesario suponer el valor de esas variables para inicializar el proceso de solución, y recalcularlas en algún momento de ese proceso, típicamente a través de una de las expresiones o de la expresión que se eliminó en la primera etapa del algoritmo. Otra forma de ver el problema al llegar a la situación de no tener columnas solamente con una incidencia es el de resolver el subsistema que queda en forma simultánea y posteriormente la otra parte, dada por el conjunto de ecuaciones y variables que sí se eliminaron, en forma secuencial.

Los siguientes ejemplos ilustran el uso del algoritmo de Lee y Rudd para un caso en el cual la solución es totalmente secuencial (Ejemplo 4.2) y para otro caso en el que la solución presenta reciclos (Ejemplo 4.3).

Ejemplo 4.2

La Figura 4.2 muestra un sistema de intercambio de calor que se lleva a cabo en dos equipos en serie. Las ecuaciones que describen el sistema consisten básicamente de balances de energía y ecuaciones de diseño con las correspondientes relaciones de definición para cada intercambiador, y son las siguientes:

Para el intercambiador 1:

$$Q_1 = m_h c_h (T_{h0} - T_{hi}) \tag{4.7}$$

$$Q_1 = m_1 c_1 (T_{1f} - T_{10}) \tag{4.8}$$

$$Q_1 = U_1 A_1 \Delta T_1 \tag{4.9}$$

$$U_1 = U_1(m_h, T_{h0}, T_{hi}, m_1, T_{10}, T_{1f},) \tag{4.10}$$

$$\Delta T_1 = \frac{(T_{hi} - T_{10}) - (T_{h0} - T_{1f})}{\ln \dfrac{T_{hi} - T_{10}}{T_{h0} - T_{1f}}} \tag{4.11}$$

Para el intercambiador 2:

$$Q_2 = m_h c_h (T_{hi} - T_{hf}) \tag{4.12}$$

$$Q_2 = m_2 c_2 (T_{2f} - T_{20}) \tag{4.13}$$

$$Q_2 = U_2 A_2 \Delta T_2 \tag{4.14}$$

$$U_2 = U_2(m_h, T_{hi}, T_{hf}, m_2, T_{20}, T_{2f},) \tag{4.15}$$

$$\Delta T_2 = \frac{(T_{hf} - T_{20}) - (T_{hi} - T_{2f})}{\ln \dfrac{T_{hf} - T_{20}}{T_{hi} - T_{2f}}} \tag{4.16}$$



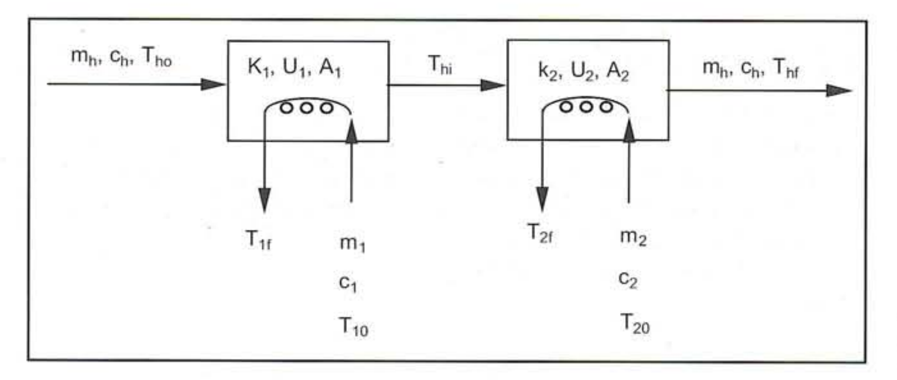


FIGURA 4.2
Intercambiadores de calor en serie.

Formamos primero la matriz de incidencia, donde los renglones representan las ecuaciones y las columnas las variables involucradas. El sistema consiste de 10 ecuaciones con 13 incógnitas, lo cual implica que se tienen 3 grados de libertad, es decir, deben de especificarse los valores de 3 de las variables involucradas (variables de diseño) para poder resolver el problema.

Apliquemos ahora el algoritmo para seleccionar las mejores variables de diseño y detectar la secuencia de cálculo en la solución del problema. Notamos primero que la variable A_2 está contenida sólo una vez en el sistema de ecuaciones; se elimina esa columna con su respectivo renglón (ecuación 14), como se muestra en el paso 1. La matriz reducida consiste ahora de 9 renglones y 12 columnas. Seleccionamos en seguida U_2 para ser eliminada, lo cual elimina a su vez a la ecuación 15 (ver paso 2). El proceso se repite con esta lógica, lo cual se ilustra en los pasos 3 al 10. Las variables que quedaron sin eliminar representan las mejores variables de diseño, en este caso Q_1, m_1 y m_2.

VARIABLE

Ecn	Q_1	Q_2	T_{hi}	T_{1f}	m_1	U_1	A_1	ΔT_1	m_2	T_{2f}	U_2	A_2	ΔT_2
(7)	X		X										
(8)	X			X	X								
(9)	X					X	X	X					
(10)			X	X	X	X							
(11)			X	X				X					
(12)		X	X										
(13)		X							X	X			
(14)		X									X	X	X
(15)			X						X	X	X		
(16)			X							X			X

Paso 1

VARIABLE

Ecn	Q_1	Q_2	T_{hi}	T_{1f}	m_1	U_1	A_1	ΔT_1	m_2	T_{2f}	U_2	ΔT_2
(7)	X		X									
(8)	X			X	X							
(9)	X					X	X	X				
(10)			X	X	X	X						
(11)			X	X				X				
(12)		X	X									
(13)		X							X	X		
(15)			X						X	X	X	
(16)			X							X		X

Paso 2

VARIABLE

Ecn	Q_1	Q_2	T_{hi}	T_{1f}	m_1	U_1	A_1	ΔT_1	m_2	T_{2f}	ΔT_2
(7)	X		X								
(8)	X			X	X						
(9)	X					X	X	X			
(10)			X	X	X	X					
(11)			X	X				X			
(12)		X	X								
(13)		X							X	X	
(16)			X							X	X

Paso 3

VARIABLE

Ecn	Q_1	Q_2	T_{hi}	T_{1f}	m_1	U_1	A_1	ΔT_1	m_2	ΔT_2
(7)	X		X							
(8)	X			X	X					
(9)	X					X	X	X		
(10)			X	X	X	X				
(11)			X	X				X		
(12)		X	X							
(13)		X							X	X

Paso 4

VARIABLE

Ecn	Q_1	Q_2	T_{hi}	T_{1f}	m_1	U_1	A_1	ΔT_1	m_2
(7)	X		X						
(8)	X			X	X				
(9)	X					X	X	X	
(10)			X	X	X	X			
(11)			X	X				X	
(12)		X	X						

Paso 5

VARIABLE

Ecn	Q_1	T_{hi}	T_{1f}	m_1	U_1	A_1	ΔT_1	m_2
(7)	X	X						
(8)	X		X	X				
(9)	X				X	X	X	
(10)		X	X	X	X			
(11)		X	X				X	

Paso 6

VARIABLE

Ecn	Q_1	T_{hi}	T_{1f}	m_1	U_1	ΔT_1	m_2
(7)	X	X					
(8)	X		X	X			
(10)		X	X	X	X		
(11)		X	X			X	

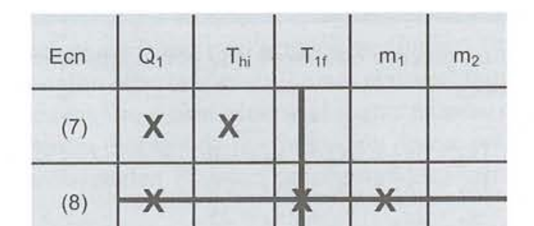
Paso 7

VARIABLE

Ecn	Q_1	T_{hi}	T_{1f}	m_1	ΔT_1	m_2
(7)	X	X				
(8)	X		X	X		
(11)		X	X		X	

Paso 8

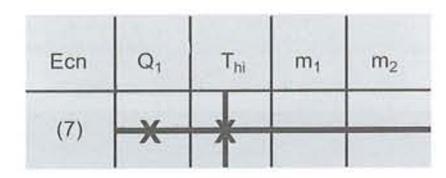
VARIABLE



Ecn	Q_1	T_{hi}	T_{1f}	m_1	m_2
(7)	X	X			
(8)	X		X	X	

Paso 9





Ecn	Q_1	T_{hi}	m_1	m_2
(7)	X	X		

Paso 10

La secuencia de cálculo es el inverso del proceso de eliminación, y se muestra en la Figura 4.3. Notar que la solución no presenta reciclos, ya que cada variable que se requiere para la solución de cada ecuación en la forma descrita se tiene ya conocida, ya sea como variable de diseño, o como una variable de estado que proviene de la solución de alguna de las ecuaciones de los pasos anteriores.

Fijar los valores de Q_1, m_1, m_2

↓

De la Ec. (7) $T_{hi} = f(Q_1)$

↓

De la Ec. (8) $T_{1f} = f(Q_1, m_1)$

↓

De la Ec. (11) $\Delta T_1 = f(T_{hi}, T_{1f})$

↓

De la Ec. (10) $U_1 = f(T_{hi}, T_{1f}, m_1)$

↓

De la Ec. (9) $A_1 = f(Q_1, U_1, \Delta T_1)$

↓

De la Ec. (12) $Q_2 = f(T_{hi})$

↓

De la Ec. (13) $T_{2f} = f(Q_2, m_2)$

↓

De la Ec. (16) $\Delta T_2 = f(T_{hi}, T_{2f})$

↓

De la Ec. (15) $U_2 = f(T_{hi}, m_2, T_{2f})$

↓

De la Ec. (14) $A_2 = f(Q_2, U_2, \Delta T_2)$

Figura 4.3
Secuencia de cálculo en la solución del Ejemplo 4.2.

Ejemplo 4.3

Suponga que un proceso está modelado por el siguiente conjunto de cinco ecuaciones.

$$
\begin{aligned}
2x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 6x_4 + x_5 &= 10 \qquad (1)\\
4x_2 + x_3 + 3x_4 + 4x_5 &= 20 \qquad (2)\\
x_2 + 2x_3 + x_5 &= 25 \qquad (3)\\
3x_3 + 2x_5 &= 15 \qquad (4)\\
2x_1 + 7x_2 + 6x_3 + 9x_4 + 5x_5 &= 30 \qquad (5)
\end{aligned}
$$

Determine los grados de libertad del sistema, la mejor forma de satisfacer esos grados de libertad y el orden de solución del sistema de ecuaciones.

Solución

A primera vista, el sistema pareciera estar completamente definido, ya que se tienen 5 ecuaciones con 5 incógnitas. Sin embargo, una observación más detallada indica que el sistema no es linealmente dependiente, ya que la última ecuación puede obtenerse a partir de la suma de las dos primeras. Por lo tanto, se puede eliminar una de esas tres y el sistema es ahora linealmente independiente (un ejemplo de estos casos se observa al escribir N+1 balances de materia para un sistema sin reacción química con N componentes; sólo N balances constituyen un sistema de ecuaciones independiente, ya que el balance adicional representa una combinación lineal de los otros). Eliminemos en este caso la Ecuación 5. Tenemos por lo tanto un grado de libertad.

Para determinar la mejor variable de diseño desde un punto de vista numérico, usemos el algoritmo de Lee y Rudd. De la construción inicial de la matriz de incidencia se detecta que la primera columna contiene un sola X, por lo cual se elimina esa columna y ese renglón:

VARIABLE

Ec.	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1	(X)	X	X	X	X
2		X	X	X	X
3		X	X	X	X
4			X	X	X

La matriz residual ya no contiene columnas con una sola incidencia. Por lo tanto, deben eliminarse tantos renglones como sea necesario para generar una sola incidencia en alguna columna. La columna

correspondiente a x_2 presenta el menor número de incidencias (2), lo cual indica que el número mínimo de renglones a elminar es uno. No hace diferencia en este caso cuál renglón se elimina. En general, al eliminar un renglón debe buscarse eliminar el mayor número de incidencias en ese renglón, o bien generar el mayor número de columnas con una incidencia después de la eliminación de ese renglón. Eliminando el segundo renglón, el sistema queda como se ilustra en seguida.

VARIABLE

Ec.	x_2	x_3.	x_4	x_5
2	X	X	X	X
3	X	X	X	X
4		X	X	X

De la matriz residual puede eliminarse la columna de x_2 con su ecuación correspondiente.

VARIABLE

Ec.	x_2	x_3	x_4	x_5
3	(X)	X	X	X
4		X	X	X

Finalmente, cualquiera de las 3 variables que quedan puede elegirse para eliminarla junto con la ecuación 4. Si se elimina x_3, quedan x_4 y x_5 sin eliminar. Una de ellas es una variable de diseño que corresponde al grado de libertad que tenía el problema original. La otra es una *variable de reciclo*, que está asociada con la ecuación que se eliminó durante la aplicación del algoritmo. Debe distinguirse que a diferencia de las variables de diseño, una variable de reciclo forma parte de la solución numérica del problema, y el suponerla durante el proceso de solución es parte de una posible forma de resolver numéricamente el sistema de ecuaciones.

En general, la ecuación que se elimina puede utilizarse para recalcular la variable de reciclo hasta convergencia, y una vez que este lazo se cumple puede continuarse con la solución del resto de las ecuaciones. La Figura 4.4 muestra este concepto de solución aplicado a este problema. Otro esquema de solución que en ocasiones es posible implementar para eliminar la solución iterativa es mediante sustituciones sucesivas de las ecuaciones que quedaron después de haber eliminado alguna ecuación en el algoritmo, en este caso la Ecuación 2. Entonces, las ecuaciones 3 y 4 se sustituyen en la Ecuación 2 y la variable de reciclo se calcula directamente. Las ecuaciones 3 y 4 deben resolverse en seguida para salir del reciclo anterior. Con este esquema es

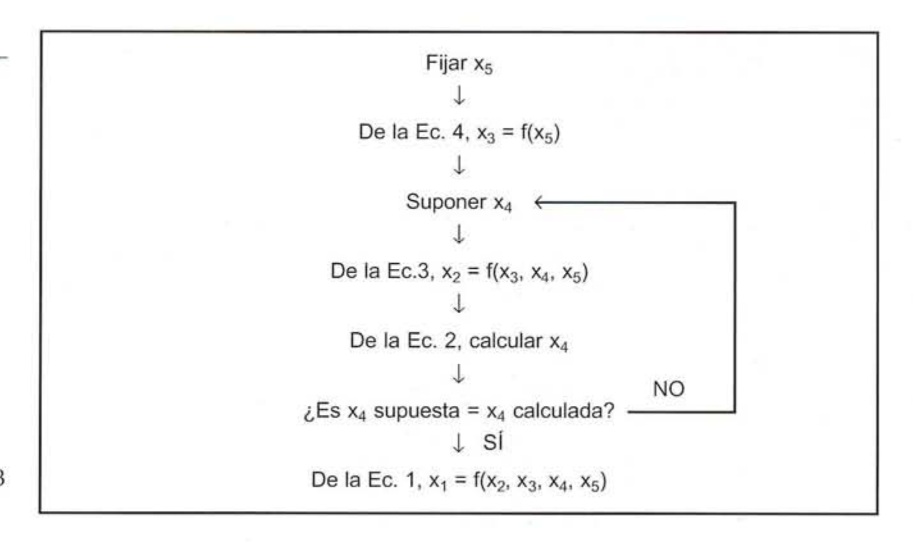


FIGURA 4.4
Secuencia de solución del Ejemplo 4.3 con reciclos.

posible calcular finalmente x_1 de la Ecuación 1 para terminar con una solución secuencial, a cambio de la manipulación algebraica del sistema original de ecuaciones. Este tipo de solución se ilustra en la Figura 4.5.

Fijar x_5

↓

Sustituir Ec. 4 en Ec. 3

Resultado: $x_2 = f(x_4, x_5)$

↓

Sustituir Ec. 4 y nueva Ec. 3 en Ec. 2

Resultado: $f(x_4, x_5) = 0$

Resolver nueva Ec. 2: $x_4 = f(x_5)$

↓

Resolver nueva Ec. 3, x_3

↓

Resolver Ec. 4, x_3

↓

Resolver Ec. 1, x_1

FIGURA 4.5
Secuencia de solución del Ejemplo 4.3 sin reciclos.

REFERENCIAS

El algoritmo descrito está publicado en los siguientes trabajos:

Lee, W., W.H. Christiansen y D.F. Rudd, "Design Variable Selection Algorithm to Simplify Process Calculations", *AIChE Journal,* 12, 12104 (1966).

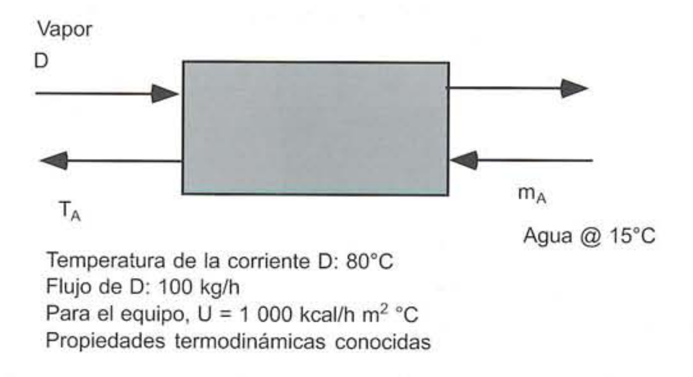
Rudd, D.F. y C.W. Watson, *Strategy of Process Engineering,* Wiley (1968).

El sistema de intercambiadores mostrado fue reportado en:

Sommerfeld, J.T., "Degrees of Freedom and Precedence Order in Engineering Calculations", *Chemical Engineering Education,* 138 (verano de 1986).

PROBLEMAS

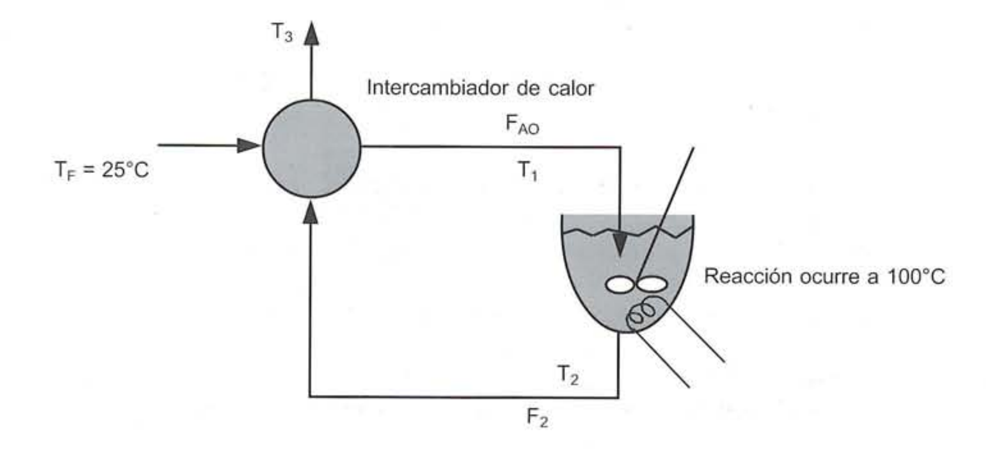
4.1 Se desea analizar el sistema de condensación mostrado en la figura. El diseño del equipo se basará en agua de enfriamiento como medio de condensación, y se conocen otras variables de acuerdo a la información proporcionada.



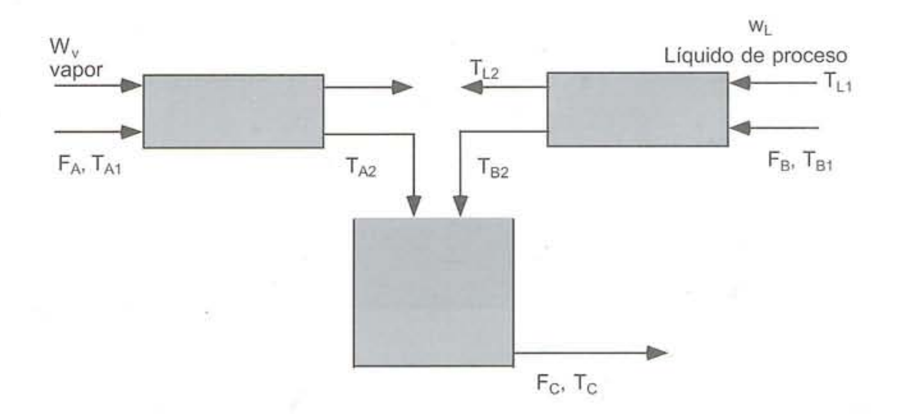
a) Escriba las ecuaciones que modelan el sistema.
b) ¿Cuántos grados de libertad existen para este caso?

4.2 Considere el sistema mostrado en la figura. Una corriente consistente de A puro pasa por un intercambiador de calor, y de ahí a un reactor continuo tipo tanque, donde ocurre la reacción A → B. El reactor opera a 100°C y la reacción es incompleta. Se conocen además los coeficientes globales de transferencia de calor del intercambiador y de la chaqueta del reactor, así como el volumen del RCTT.

a) ¿Cuántos grados de libertad tiene el sistema?
b) Indique cuáles son las mejores variables de diseño (si existen algunas) y la secuencia de cálculo para la solución del sistema.
c) Suponga que se especifica una carga de calor al reactor en vez de la temperatura de 100°C. Repita los incisos (a) y (b).



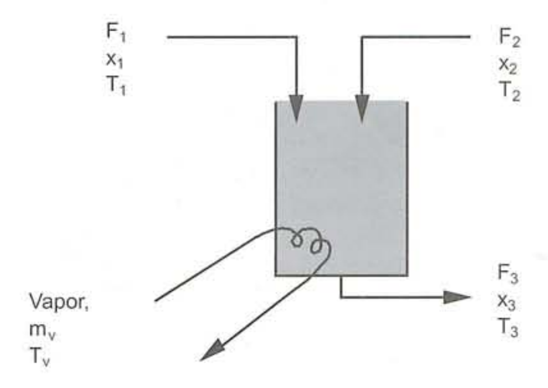
4.3 Dos líquidos de proceso, A y B, se mezclan en un tanque después de calentarse cada uno en respectivos intercambiadores de calor. Para calentar el líquido A se usa vapor de calentamiento, mientras que para calentar el líquido B se usa una corriente caliente del proceso con el fin de ahorrar energía.



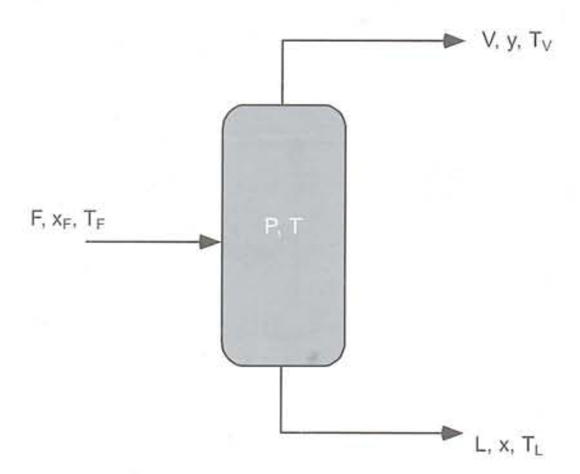
a) Escriba las ecuaciones que modelan el sistema. Ignore las ecuaciones de diseño de los equipos.
b) Suponiendo que todas las propiedades termodinámicas de cualquier corriente son conocidas, y que se conocen los flujos F_A y F_B, así como las temperaturas T_{A1}, T_{B1} y T_{L1}, indique cuáles son los grados de libertad del sistema.
c) Aplique el algoritmo de Lee y Rudd para sugerir las mejores variables de diseño y el orden de solución de las ecuaciones.

4.4 Se tiene un sistema de mezclado como el que se muestra en la figura. Dos corrientes disponibles a diferentes temperaturas con diferentes concentraciones de un soluto se alimentan al tanque, el cual tiene un serpentín de calentamiento para ajustar la temperatura de salida hasta un nivel deseado. No se lleva a cabo ninguna reacción química. Las variables conocidas son x_1, x_2, T_1, T_2, T_v, el coeficiente global de transferencia de calor U y todas las propiedades termodinámicas de la mezcla y de los componentes.

a) Escriba las ecuaciones que modelan el sistema.
b) ¿Cuántos grados de libertad existen?



4.5 Una mezcla de dos componentes A y B, donde A es más volátil que B, va a separarse adiabáticamente en un separador de vaporización dábitz o "flash". La siguiente figura muestra esquemáticamente las variables de interés.



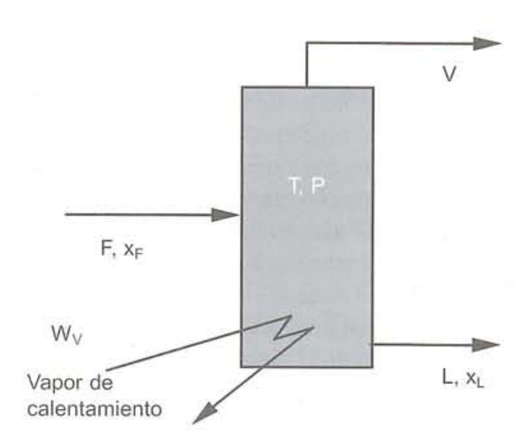
Desarrolle primero el modelo que representa este sistema. Analice a continuación el tipo de situación que se presenta para la solución del modelo si se especifican:

a) las condiciones de alimentación, la presión del separador, el flujo de vapor y su composición;
b) las condiciones de alimentación, la presión del separador y el flujo de vapor;
c) las condiciones de alimentación solamente y la presión del separador.

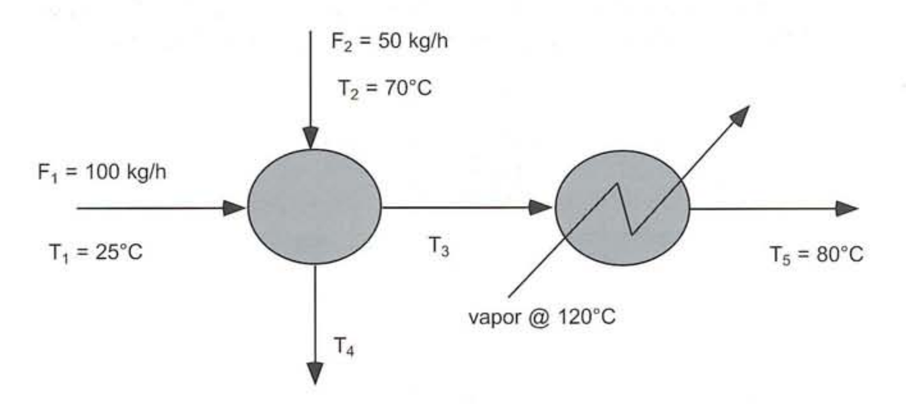
Suponga que se conocen valores promedio para todas las propiedades termodinámicas de la mezcla.

4.6 Considere el sistema de evaporación mostrado en la figura.

a) Escriba las ecuaciones que modelan el proceso.
b) Si se conoce la alimentación y todas sus características, indique cuál es el número de grados de libertad que existen.
c) Utilice al algoritmo de Lee y Rudd para obtener las mejores variables de diseño y el orden de solución de las ecuaciones.

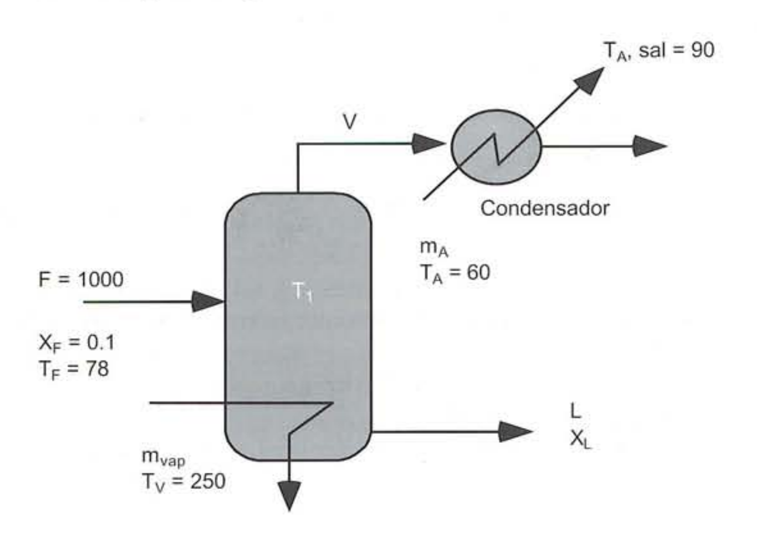


4.7 Considere el sistema de intercambio de calor mostrado en la figura.



a) Escriba las ecuaciones que modelan el sistema.
b) Dados los datos proporcionados en el diagrama, y suponiendo que todas las propiedades termodinámicas que se requieren son conocidas, indique cuántos grados de libertad tiene el sistema.

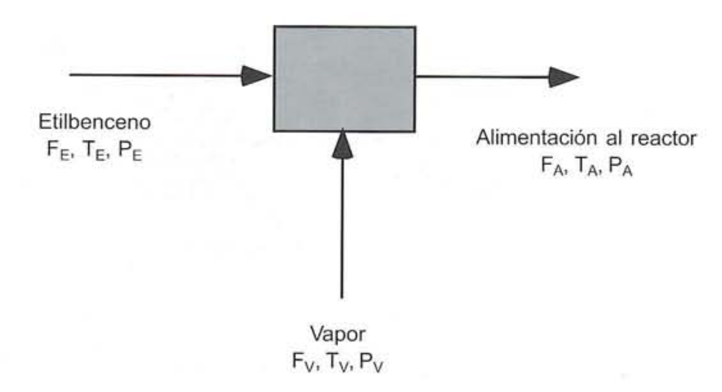
4.8 Se tiene un sistema de evaporación con condensación del vapor, de acuerdo con la siguiente figura.



Los flujos están dados en lb/h y las temperaturas en °F. Se conocen además los coeficientes globales de transferencia de calor, que tanto para el evaporador como para el condensador tienen un valor de 200 Btu/h ft^2 °F.

a) Escriba las ecuaciones que modelan el sistema. Incluya los balances y las ecuaciones de diseño relevantes. Para los balances de energía, exprese todas las entalpías en función de Cp's y calores latentes (λ).
b) Si todas las propiedades termodinámicas son conocidas, indique cuántos grados de libertad tiene el sistema.
c) En caso de que existan grados de libertad, encuentre las mejores variables de diseño usando el algoritmo de Lee y Rudd.

4.9 Considere la alimentación a un reactor de producción de estireno, consistente de una mezcla de vapor y etilbenceno, con sus respetivos valores de flujos, temperaturas y presiones de acuerdo al siguiente diagrama.



Se establecen las siguientes restricciones:

i) Para mantener el catalizador en condiciones óptimas se requiere que

$F_V/F_E = 10$

ii) La alimentación al reactor debe cumplir con

$T_A = 600°C$, $P_A = 1.8$ atm

iii) Se conocen el consumo de etilbenceno y sus condiciones,

$F_E = 55T/h$, $T_E = 80°F$, $P_E = 1$ atm

Tomando en cuenta esta información, desarrolle los siguientes puntos.

a) Escriba el modelo que describe este proceso de mezlado. Suponga que las entalpías de las corrientes son función tanto de la temperatura como de la presión.
b) Indique cuántos grados de libertad tiene el sistema.
c) Aplique el algoritmo de Lee y Rudd para identificar el orden de solución de las ecuaciones y las mejores variables de diseño.

5

PRINCIPIOS DE OPTIMIZACIÓN

5.1 Técnicas de optimización
5.2 Optimización de una variable
5.3 El método de la Sección Dorada
5.4 Método de Fibonacci
5.5 Otros métodos de optimización

En el análisis y diseño de sistemas de ingeniería ocurren muchas veces situaciones que provocan efectos conflictivos en cuanto a su economía o algún objetivo establecido. Por ejemplo, en el diseño de columnas de destilación, el aumentar la razón de reflujo tiende a disminuir el costo fijo de la columna a expensas de un mayor costo de servicios. Un valor óptimo de la razón de reflujo bajo un objetivo económico sería aquel que minimizara una combinación de ambos costos. En muchas ocasiones, la búsqueda de este valor óptimo no es trivial; de aquí se establece la necesidad de contar con técnicas de optimización para encontrar esos mejores valores de las variables de diseño.

5.1 Técnicas de optimización

Para optimizar un sistema se debe establecer una función objetivo, la cual trata de maximizar algún tipo de beneficios o salidas del sistema, o de minimizar algún tipo de costos o entradas al proceso. Relaciones adicionales en forma de balances de materia, balances de energía, ecuaciones de diseño y estipulación de algunas variables constituyen restricciones bajo las cuales la búsqueda se va a llevar a cabo.

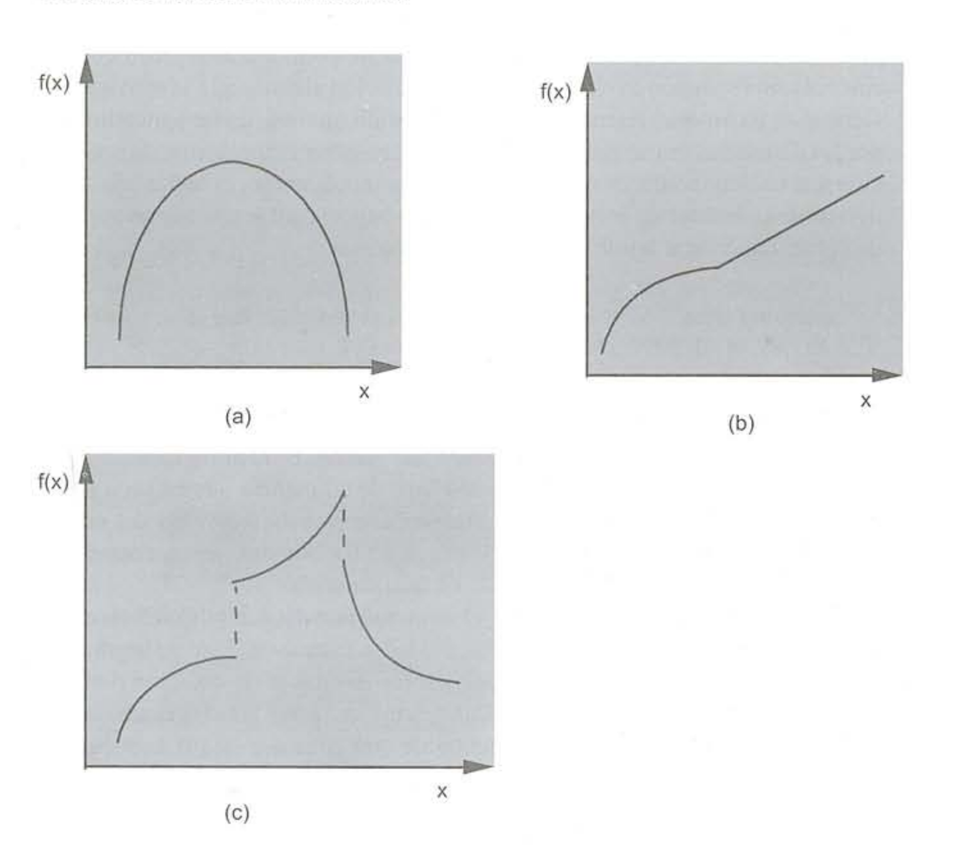
Si existe un solo grado de libertad, se tiene un caso de optimización de una variable; si existen varios grados de libertad, entonces la optimización se conoce como multivariable. El tipo de relaciones que definen la función objetivo y las restricciones del sistema sirven también para clasificar el problema. Si todas las relaciones son lineales (y todas las variables son continuas), se tiene un problema de programación lineal; en caso de no cumplirse lo anterior, se tiene un problema de programación no lineal. Aún más, si alguna de las variables es discreta, es decir, que sólo puede tomar valores enteros (por ejemplo, se construye una o algunas plantas, pero no una fracción de ellas), entonces se tiene un problema de programación entera, si todas las variables de búsqueda son enteras, o de programación mixta-entera, si algunas variables son continuas y otras son enteras; estos tipos de formulaciones pueden ser lineales o no lineales, dependiendo de las relaciones matemáticas que se estipulan.

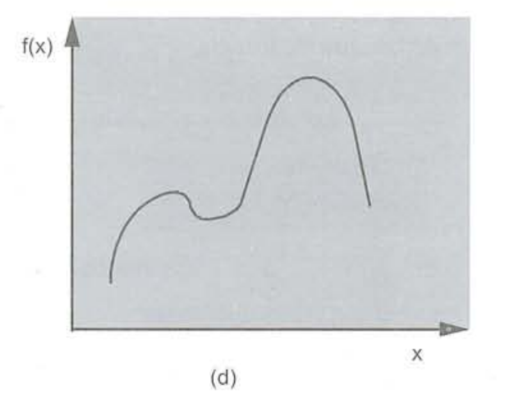
5.2 Optimización de una variable

El caso más simple de solución de un problema de optimización es cuando se pueden usar los principios de cálculo diferencial. La derivada de la función con respecto a la variable de interés igualada a cero proporciona el máximo o el mínimo que se busca. Este procedimiento requiere de relaciones matemáticas explícitas y continuas. En muchos casos, este requerimiento no se cumple, o las relaciones están dadas en forma de tablas o gráficas y no pueden usarse directamente los principios de cálculo diferencial. Este aspecto es muy común en sistemas ingenieriles, y establece la necesidad de técnicas de búsqueda.

Las técnicas de búsqueda se basan en el concepto de eliminación de regiones. La función objetivo se evalúa en varios puntos contenidos en el espacio de búsqueda y se rechaza la región que contiene los peores valores obtenidos; la región remanente contiene el mejor punto que se ha detectado hasta ese momento. Este proceso se repite de tal forma que la región de búsqueda se va aislando hasta que contenga el punto óptimo dentro de una aproximación deseada.

La función objetivo para un problema de optimización debe ser unimodal para que el valor óptimo global se garantice al resolver el problema mediante algún método numérico; en caso contrario, funciones no unimodales conducen a soluciones que no garantizan un valor óptimo global, aunque la solución que se obtiene corresponde cuando menos a un óptimo local. Cabe mencionar que las funciones unimodales no necesariamente deben ser continuas o diferenciables. En la Figura 5.1 se muestran algunos tipos de funciones unimodales y no unimodales. Afortunadamente, la mayoría de los problemas de ingeniería parecen ofrecer funciones unimodales.





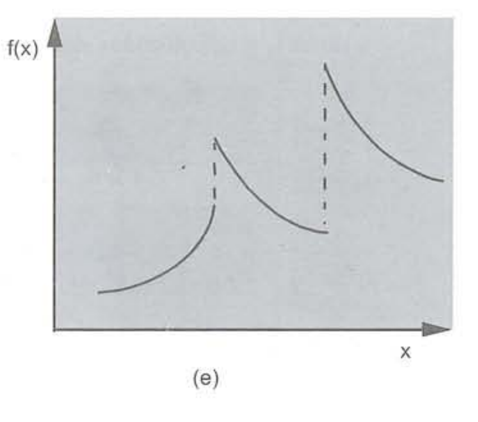


FIGURA 5.1
Ejemplos de funciones unimodales (a,b y c) y funciones no unimodales (d y e).

El establecimiento de la función objetivo en un problema de optimización amerita un par de comentarios adicionales, pues representa un punto importante en esta área. La función objetivo no constituye parte del modelo del sistema bajo estudio, de tal forma que no entra en la contabilidad de los grados de libertad del problema, sino que sólo sirve de guía en la búsqueda de un valor óptimo. Por otro lado, si la función objetivo no refleja con precisión el conflicto que típicamente quiere evaluarse en un problema de optimización, entonces la solución óptima del problema bajo una formulación mal hecha es generalmente trivial. Las restricciones del problema influyen en la forma en que una función objetivo puede establecerse apropiadamente. Por ejemplo, si la función objetivo de un problema de producción industrial es simplemente minimizar costos, entonces una solución trivial es no tener producción alguna; este evento se previene si se incorporan restricciones de producción mínima, dadas generalmente por las demandas de ese producto. Si se desea resolver un problema de producción que no tiene restricciones de producción mínima, entonces la función objetivo deberá contener un compromiso explícito bajo el cual se aplique un método de optimización que arroje resultados satisfactorios.

5.3 El Método de la Sección Dorada

Uno de los métodos más efectivos para optimizar problemas de una variable es el conocido como Sección Dorada o Sección Áurea. El método se basa en la colocación de puntos de búsqueda simétricos, de tal manera que en cada iteración, el punto que se conserva sirve como base para la selección del nuevo punto, el cual a su vez debe conservar la simetría original, pero acotando la solución óptima dentro de un intervalo de búsqueda menor.

La idea básica es economizar el número de evaluaciones de función y acotar la solución óptima en intervalos anidados sucesivos. Esto se logra evaluando la función objetivo f(x) en dos puntos interiores de cada intervalo: l_i (lado izquierdo) y r_i (lado derecho) contenidos en $[a_i,b_i]$ y eliminando ya sea $[a_i,l_i]$ o $[r_i,b_i]$ del problema, dependiendo de qué zona sea la que contenga el peor punto de los dos evaluados. La clave del método es que el punto interior que permanece sin eliminar, l_i o r_i, puede usarse para la siguiente iteración.

Deducción del método

Comencemos con una estructura inicial, que consiste de los límites de búsqueda especificados (lo cual define el intervalo inicial $[a_0, b_0]$), más dos puntos interiores l_0 y r_0, colocados simétricamente de la siguiente manera

$$l_0 = b_0 - \tau(b_0 - a_0) \tag{5.1}$$

$$r_0 = a_0 + \tau(b_0 - a_0) \tag{5.2}$$

Al evaluar la función objetivo en cada uno de estos dos puntos interiores, se comparan los valores obtenidos, y se rechaza la región comprendida a la

izquierda de l_0 o la comprendida a la derecha de r_0, dependiendo de cuál de estos puntos generó el peor valor de la función objetivo. Consideremos el caso mostrado en la Figura 5.2; en este caso, se supone que la función evaluada en r_0 proporciona un peor valor de la función objetivo que el obtenido con el punto l_0, por lo que se rechaza la región $[r_0,b_0]$. El proceso de búsqueda se optimiza si el punto remanente l_0 se conserva para la siguiente iteración. La pregunta es si conviene hacer que l_0 se vuelva l_1 o r_1. Exploremos esas dos opciones.

```
x__________x_____x__________x
a0         l0    r0         b0

x__________x_____x
a1         l0    b1
```

FIGURA 5.2
Las dos primeras iteraciones del método de Sección Dorada, suponiendo que el punto r_0 es peor que el punto l_0.

Ensayo de $l_0 = l_1$

El valor de l_0 está dado por la ecuación 5.1; el valor de l_1 sería entonces

$$l_1 = r_0 - \tau[\tau(b_0 - a_0)]$$

o bien

$$l_1 = [a_0 + \tau(b_0 - a_0)] - \tau[\tau(b_0 - a_0)] \tag{5.3}$$

Igualando 5.1 y 5.3, se obtiene

$$(b_0 - a_0)(\tau^2 - 2\tau + 1) = 0$$

de donde,

$$\tau = 1$$

lo cual no es satisfactorio debido a que τ debe ser menor que uno para lograr una reducción del intervalo de búsqueda en cada iteración.

Ensayo de $l_0 = r_1$

El valor de r_1 está dado por

$$r_1 = a_0 + \tau[\tau(b_0 - a_0]$$ (5.4)

Igualando con 5.1,

$$(b_0 - a_0)(\tau^2 + \tau - 1) = 0$$

de donde, ignorando la raíz negativa de esta ecuación cuadrática por carecer de significado, se obtiene,

$$\tau = 0.618$$

Este resultado establece la base para el método de Sección Dorada. El procedimiento consiste en colocar puntos simétricos de acuerdo a las ecuaciones 5.1 y 5.2, y en rechazar el peor punto de los dos con su respectiva región adyacente, ya que todos los puntos contenidos en esa región ofrecen un valor de la función objetivo igual o peor que el que se ha evaluado (suponiendo que la función es unimodal); el punto que se conserva sirve de base para la siguiente iteración con un cambio en su posición relativa para el nuevo espacio de búsqueda, es decir, si en la iteración $i - 1$ se rechazó la región derecha (incluyendo el punto r_{i-1}), el punto izquierdo l_{i-1} será el punto derecho r_i para la siguiente iteración i, evaluando l_i para el intervalo reducido $[a_i, b_i]$ de manera similar a la ecuación 5.1,

$$l_i = b_i - \tau[b_i - a_i]$$

Un procedimiento análogo se usa en caso de eliminar el punto l_{i-1} y la porción izquierda $[a_{i-1}, l_{i-1}]$ del intervalo existente en la iteración $i - 1$.

Reducción de intervalo

La contracción que se logra en el espacio de búsqueda con el método de Sección Dorada está dada por:

$$C_n = \tau_{n-1} = (0.618)^{n-1}$$

donde n es el número de evaluaciones de función, equivalentes a $n - 2$ iteraciones (recordar que este número de iteraciones implica que la colocación de puntos iniciales se ha definido como la iteración 0). Esta relación puede servir para establecer el número de iteraciones que se requiere en un problema dado para alcanzar una aproximación deseado en el valor óptimo.

Ejemplo 5.1. Aplicación del Método de Sección Dorada

Encontrar el mínimo de la función $f(x) = x^2 - x$ en el intervalo (0, 2). Usar cuatro iteraciones.

Solución

Podemos predecir primero el grado de reducción del intervalo original para las cuatro iteraciones que se desean, las cuales equivalen a $n = 6$

evaluaciones de función. Por lo tanto,

$$C_6 = (0.618)^{6-1} = 0.09$$

o 9% del intervalo original

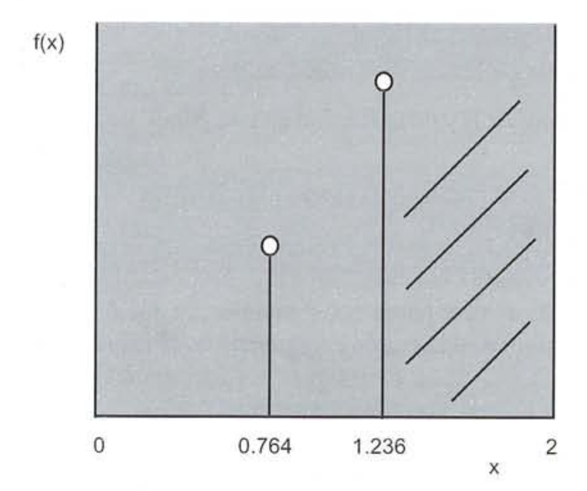
Iteración 0. Colocación de puntos iniciales

$$l_o = b_o - \tau(b_o - a_o) = 2 - 0.618\ (2 - 0) = 0.764$$
$$r_o = a_o + \tau(b_o - a_o) = 0 + 0.618\ (2 - 0) = 1.236$$

Evaluando la función en estos puntos se obtiene

$$f(l_o) = -0.180$$
$$f(r_o) = 0.292$$

El peor punto es r_o, por lo que se rechaza el intervalo $(r_o, b_o) = (1.236, 2)$ como se muestra esquemáticamente a continuación



Iteración 1

El intervalo remanente (a_1, b_1) es $(0, 1.236)$.

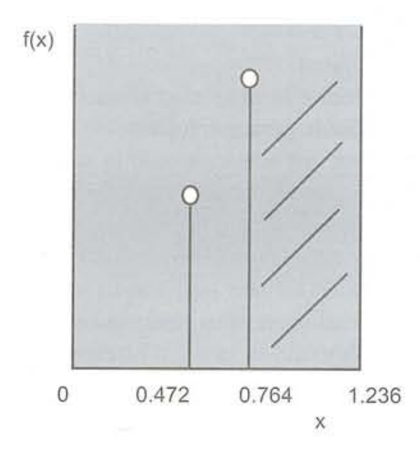
El punto $l_o = 0.754$ se convierte en r_1, por lo que debemos evaluar el punto l_1 para esta iteración.

$$l_1 = b_1 - \tau(b_1 - a_1) = 1.236 - 0.618\ (1.2236 - 0) = 0.472$$

El valor de la función en este punto es

$$f(l_1) = -0.249$$

Como $f(r_1) > f(l_1)$ y estamos minimizando la función, debe rechazarse la región a la derecha de r_1, es decir (0.764, 1.236), como se esquematiza en seguida



Iteración 2

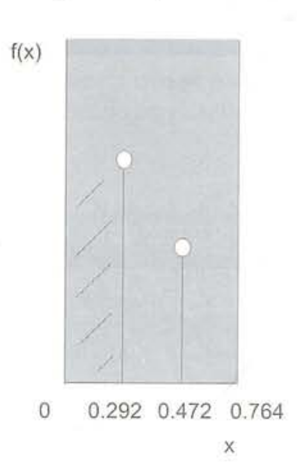
El intervalo que queda es (0, 0.764), y ahora

$l_1 \Rightarrow r_2 = 0.472$ con $f(r_2) = -0.249$

El valor de l_2 y de la función en este punto son

$l_2 = b_2 - \tau\,(b_2 - a_2) = 0.764 - 0.618\,(0.764 - 0) = 0.292$
$f(l_2) = -0.207$

Este es un peor punto que el anterior, ya que $f(l_2) > f(r_2)$, por lo que debe eliminarse la región comprendida a la izquierda de l_2.



Iteración 3

Similarmente

$(a_3, b_3) = (0.292, 0.764)$
$r_2 => l_3 = 0.472; f(l_3) = -0.249$

$r_3 = a_3 + \tau (b_3 - a_3) = 0.584$
$f(r_3) = -0.243$

Como $f(r_3) > f(l_3)$, se rechaza el intervalo $(r_3, b_3) = (0.584, 0.764)$

Iteración 4

$(a_4, b_4) = (0.292, 0.584)$
$l_3 => r_4 = 0.472; f(r_4) = -0.249$
$l_4 = 0.403$
$f(l_4) = -0.240$
Eliminar (0.292, 0.403)

Hasta este nivel, el óptimo se ha acotado en el intervalo (0.403, 0.584), el cual corresponde al 9% del intervalo original. El mejor punto obtenido en cuatro iteraciones es

$x^* = 0.472$

La solución exacta al problema es $x^* = 0.5$

5.4 MÉTODO DE FIBONACCI

Un procedimiento similar al método de la Sección Dorada lo constituye el método de Fibonacci, con la variación de que el factor de contracción τ_i no es constante, sino que cambia en cada iteración. Procedamos con un análisis similar al que se usó para demostrar el método de Sección Dorada para determinar cómo varía τ_i.

Considérese el esquema mostrado en la Figura 5.3. Supongamos que se rechaza la región derecha del intervalo, $[r_{i-1}, b_{i-1}]$, y analicemos las dos opciones de cambio para el punto remanente l_{i-1}.

x_________x____x_________x
a_{i-1} l_{i-1} r_{i-1} b_{i-1}
x_________x____x
a_i l_{i-1} b_i

FIGURA 5.3
Dos iteraciones consecutivas del método de Fibonacci.

Análisis de hacer $l_{i-1} = l_i$

El valor de l_{i-1} está dado por

$$l_{i-1} = b_{i-1} - \tau_{i-1}[b_{i-1} - a_{i-1}] \tag{5.5}$$

mientras que l_i equivale a

$$l_i = [a_{i-1} + \tau_{i-1}(b_{i-1} - a_{i-1})] - \tau_i[\tau_{i-1}(b_{i-1} - a_{i-1})] \tag{5.6}$$

Igualando las dos ecuaciones anteriores se obtiene

$$(b_{i-1} - a_{i-1})(\tau_i \, \tau_{i-1} - 2\, \tau_{i-1} + 1) = 0$$

Esta ecuación se satisface en forma trivial mediante

$$\tau_i = \tau_{i-1} = 1$$

lo cual no es de utilidad puesto que se requiere que τ_i sea menor que uno.

Análisis de $l_{i-1} = r_i$

En este caso se obtiene

$$b_{i-1} - \tau_{i-1}(b_{i-1} - a_{i-1}) = a_{i-1} + \tau_i \, \tau_{i-1}(b_{i-1} - a_{i-1})$$

de donde

$$(b_{i-1} - a_{i-1})(\tau_i \, \tau_{i-1} + \tau_{i-1} - 1) = 0$$

Necesitamos satisfacer la ecuación de diferencias de primer orden

$$\tau_i \, \tau_{i-1} + \tau_{i-1} - 1 = 0 \tag{5.7}$$

para lo cual se requiere de una condición inicial o de una condición terminal. Este requisito se cumple mediante el siguiente análisis. Supongamos que $n \geq 3$ es un número fijo de evaluaciones de función permisibles. Entonces, se tiene el siguiente esquema de evaluaciones de función:

Iteración, i	0	1	2	...	n–3	n–2
Número acumulativo de evaluaciones de función	2	3	4	...	n–1	n
Valor de τ_i	τ_0	τ_1	τ_2	...	τ_{n-3}	τ_{n-2}

|—— βL_{n-3} ——|

$\beta = \tau_{n-3}$;
$L_{n-3} = [b_{n-3} - a_{n-3}]$

x______x______x______x
a_{n-3} l_{n-3} r_{n-3} b_{n-3}

x______x______x
a_{n-2} r_{n-2} b_{n-2}

|———|———|
$(1-\beta)L_{n-3}$ $(2\beta-1)L_{n-3}$

FIGURA 5.4
Las dos últimas iteraciones del método de Fibonacci.

Examinemos la penúltima iteración. Para simplificar, hagamos $\tau_{n-3} = \beta$ (ver Figura 5.4). Con objeto de maximizar la región de rechazo en la última iteración (y por lo tanto minimizar la longitud del último intervalo remanente), conviene escoger β de tal manera que el punto r_{n-2} quede exactamente a la mitad del intervalo $[a_{n-2}, b_{n-2}]$, es decir,

$$1 - \beta = 2\beta - 1$$

de donde,

$$\beta = 2/3 = \tau_{n-3}$$

lo cual implica que $\tau_{n-2} = (1+\varepsilon)/2$, donde $\varepsilon \ll 1$. Por lo tanto, podemos usar $\tau_{n-3} = 2/3$ como la condición terminal para la ecuación 5.7, de la cual se obtiene la forma recursiva para la evaluación de τ_{i-1}:

$$\tau_{i-1} = \frac{1}{1+\tau_i}$$

Aplicando esta relación, se obtienen los siguientes valores:

$$\begin{aligned}
&\tau_{n-3} = 2/3 = F_2/F_3 \\
&\tau_{n-4} = 3/5 = F_3/F_4 \\
&\tau_{n-5} = 5/8 = F_4/F_5 \\
&\tau_{n-6} = 8/13 = F_5/F_6 \\
&\dots \\
&\dots \\
&\dots \\
&\tau_1 = \tau_{n-(n-1)} = F_{n-2}/F_{n-1} \\
&\tau_0 = \tau_{n-n} = F_{n-1}/F_n
\end{aligned}$$

donde F_i son los números de Fibonacci, los cuales se obtienen al sumar los dos anteriores:

$$F_0 = 1, F_1 = 1, F_2 = 2, F_3 = 3, F_4 = 5, \dots$$

Contracción del intervalo

Después de n − 2 iteraciones, lo cual implica n evaluaciones de función, el intervalo original se reduce a una fracción equivalente a

$$
\begin{aligned}
C_n &= \frac{b_{n-2} - a_{n-2}}{b_0 - a_0} \\
&= \tau_{n-2}\, \tau_{n-3} \ldots \tau_2\, \tau_1\, \tau_0 \\
&= \frac{F_1 + \varepsilon}{F_2} \frac{F_2}{F_3} \ldots \frac{F_{n-1}}{F_n} \\
&= \frac{1 + \varepsilon}{F_n}
\end{aligned}
$$

Construcción de búsqueda mediante Fibonacci

Para n evaluaciones de función, en general, se construye la siguiente secuencia:

i:	0	1	2	...	i	...	n − 2
τ_i	$\frac{F_{n-1}}{F_n}$	$\frac{F_{n-2}}{F_{n-1}}$	$\frac{F_{n-3}}{F_{n-2}}$	...	$\frac{F_{n-i+1}}{F_{n-i}}$	...	$\frac{F_1 + \varepsilon}{F_2}$

Consideremos el caso en que n = 6 evaluaciones de función (equivalentes a 4 iteraciones):

i:	0	1	2	3	4
τ_i:	$\frac{F_5}{F_6}$	$\frac{F_4}{F_5}$	$\frac{F_3}{F_4}$	$\frac{F_2}{F_3}$	$\frac{F_1 + \varepsilon}{F_2}$
τ_i:	$\frac{8}{13}$	$\frac{5}{8}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1 + \varepsilon}{2}$

Con esta secuencia de valores de τ_i se construye la búsqueda de Fibonacci, similar a la que se sigue con el método de Sección Dorada, sólo que ahora τ varía en cada iteración.

El método de Fibonacci es sólo ligeramente superior al de Sección Dorada, como puede corroborarse al comparar las reducciones de intervalos que se logran mediante cada método.

A diferencia del método de Sección Dorada, el método de Fibonacci requiere necesariamente de que se fije el número de iteraciones antes de comenzar a aplicarlo, ya que a partir de esta información se evalúa el parámetro inicial τ_0, o en general, la secuencia de valores de τ_i. El lector puede corroborar la tendencia que toma τ_i en el método de Fibonacci a medida que el número de iteraciones que se estipulan aumenta.

Ejemplo 5.2. Aplicación del Método de Fibonacci

Minimizar la función $f(x) = (x - 4)^2$ haciendo una búsqueda en el intervalo [0, 9]. Usar 2 iteraciones.

Solución

Para n – 2 iteraciones se requiere de n = 4 evaluaciones de función. Sabemos que $\tau_{n-2} = \tau_2 = 1/2$, a partir de lo cual se construye la secuencia de valores de τ_i que se van a usar en cada iteración i:

Iteración i:	0	1	2
τ_i	3/5	2/3	1/2

Comencemos colocando los primeros puntos.

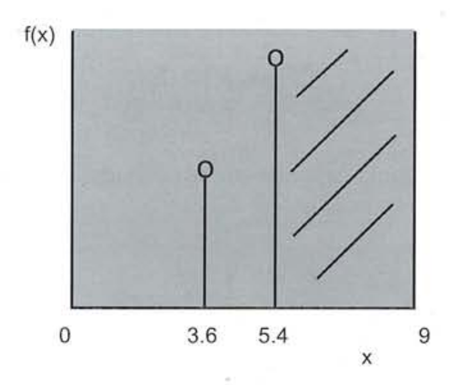
Iteración 0. Colocación de los puntos iniciales

$$[a_0, b_0] = [0, 9] \;;$$
$$l_0 = b_0 - \tau_0(b_0 - a_0) = 9 - (3/5)(9 - 0) = 3.6$$
$$r_0 = a_0 + \tau_0(b_0 - a_0) = 0 + (3/5)(9 - 0) = 5.4$$

La evaluación de la función en estos puntos resulta en

$$f(l_0) = 0.16$$
$$f(r_0) = 1.96$$

Suponiendo que la función es unimodal, rechazamos la región comprendida al lado derecho del punto r_0, como se muestra esquemáticamente en seguida:



Rechazar $[r_0, b_0] = [5.4, 9]$

Iteración 1

El intervalo reducido y el valor de τ a usarse en esta iteración son:

$$[a_1, b_1]=[0, 5.4]; \qquad \tau_1 = 2/3$$

El punto que quedó sin eliminar en la iteración anterior, que era punto izquierdo, se transforma en el punto derecho para esta iteración:

$$l_0 \Rightarrow r_1 = 3.6$$

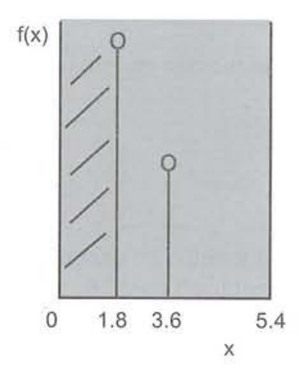
El nuevo punto izquierdo es

$$l_1 = b_1 - \tau_1(b_1 - a_1) = 5.4 - (2/3)(5.4 - 0) = 1.8$$

y la función en este punto es,

$$f(l_1) = 4.84$$

El siguiente esquema muestra el resultado para esta iteración:



Rechazar [0, 1.8]

Iteración 2

Esta es la última iteración que se ha fijado, en la cual el intervalo remanente es

$$[a_2, b_2] = [1.8, 5.4] ;$$

con

$$r_1 \Rightarrow l_2 = 3.6$$

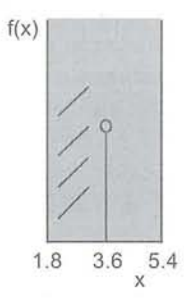
Como se trata de la última iteración, el nuevo punto de colocación r_2 debe coincidir con el punto l_2, por la forma en que el método de Fibonacci está diseñado:

$$r_2 = a_2 + \tau_2(b_2 - a_2) = 1.8 + (1/2)(5.4 - 1.8) = 3.6$$

En esta última iteración podemos eliminar la mitad de la región remanente evaluando la función en el punto $l_2 + \varepsilon$, donde ε es un número suficientemente pequeño. Tomando $\varepsilon = 0.001$,

$$f(3.61) = 0.1521$$

Debido a que la función disminuye hacia el lado derecho del punto final y tenemos un problema de minimización, entonces se rechaza la región del lado izquierdo de ese punto.

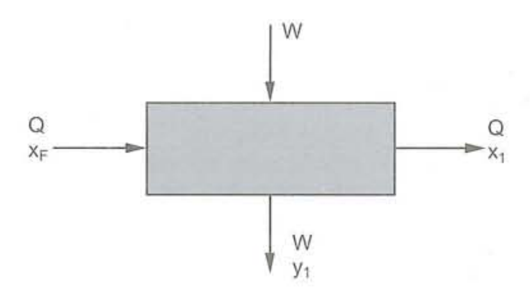


Rechazar [1.8, 3]

La aplicación del método de Fibonacci con 2 iteraciones termina con una aproximación del óptimo $x^* = 3.6$. Se detecta que el óptimo está comprendido entre 3.6 y 5.4. La solución exacta implica $x^* = 4$. Como ejercicio, repetir el problema considerando 4 iteraciones.

Ejemplo 5.3. Optimización de un sistema de extracción

Se va a diseñar un proceso de extracción líquido-líquido para recuperar un soluto valioso. Las variables relevantes de esta operación se indican en el siguiente diagrama.



El flujo de alimentación Q es de 1,000 lb de solvente/h, con una concentración de soluto de 0.20 lb de soluto/lb de solvente. Esta corriente se va a poner en contacto con un solvente de lavado W. Se desea detectar la cantidad de solvente de lavado que debe usarse para maximizar la siguiente función objetivo:

$$\max\,[Q(x_F - x_1) - \lambda W]$$

donde $Q(x_F - x_1)$ representa la cantidad de soluto extraído y λ es la relación del costo unitario de solvente de lavado al valor unitario del soluto. Usando un valor de $\lambda = 0.05$, determine la cantidad óptima de solvente de lavado.

Solución

Desarrollemos primero la modelación del sistema. Debido a la forma de la función objetivo las ecuaciones requeridas son las de balance de materia y relación termodinámica. El balance de energía no tiene ingerencia porque el proceso se lleva a cabo a temperatura constante y no existe fuente o suministro de calor; notar que implícitamente se están ignorando los calores de mezclado de las corrientes.

Balance de materia

Suponiendo que los solventes son inmiscibles, el balance total indica simplemente que

$$Q_{ent} = Q_{sal} = Q$$
$$W_{ent} = W_{sal} = W$$

Balance de soluto:

$$Q\,x_F = Q\,x_1 + W\,y_1$$

Relación termodinámica:

La relación de equilibrio entre x_1 y y_1 está dada por la Figura 5.5, la cual puede expresarse como

$$\phi(x, y) = 0$$

Un análisis de grados de libertad nos indica que tenemos un sistema de dos ecuaciones con tres incógnitas. El grado de libertad existente nos proporciona un problema de optimización de una variable. En principio, podemos usar cualquiera de ellas como variable de búsqueda. Sin embargo, por conveniencia es mejor usar x_1 ya que su valor está acotado entre 0 y x_F, lo cual facilita la búsqueda del punto óptimo.

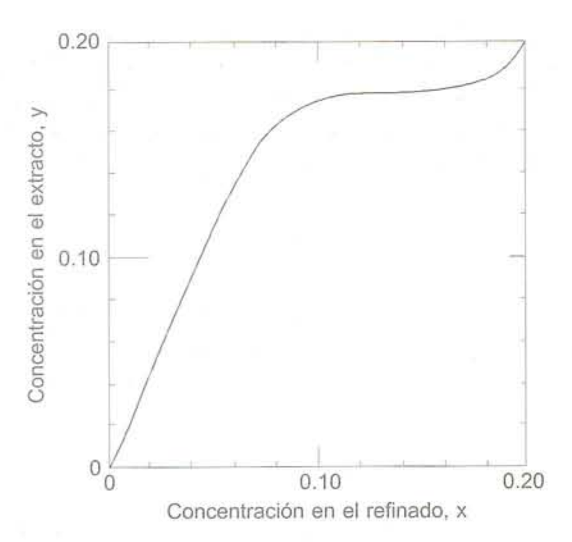


FIGURA 5.5
Relación de equilibrio para el problema de extracción.

Usando el método de Sección Dorada para optimizar el sistema, los puntos inciales de búsqueda son

$$l_0 = b_0 - \tau(b_0 - a_0) = 0.2 - 0.618(0.2 - 0) = 0.0764$$
$$r_0 = a_0 + \tau(b_0 - a_0) = 0 + 0.618(0.2 - 0) = 0.1236$$

Para el punto de búsqueda $x_1 = l_0$:

$y_1 = 0.147$ (relación termodinámica)
$W = 840.8$ (balance de materia)
$f = 81.56$ (función objetivo)

Para el punto de búsqueda $x_1 = r_0$:

$y_1 = 0.178$
$W = 429.2$
$f = 54.94$

El punto r_0 contiene un peor valor de la función objetivo, por lo tanto se elimina la región $[r_0,b_0]$. La siguiente tabla resume el proceso de búsqueda para encontrar la solución óptima.

it. i	$[a_i, b_i]$	l_i	r_i	$f(l_i)$	$f(r_i)$	eliminación
1	[0, 0.1236]	0.0472	0.0764	78.65	81.56	[0, 0.0472]
2	[0.0472, 0.1236]	0.0764	0.0944	81.56	74.9	[0.0944, 0.1236]
3	[0.0472, 0.0944]	0.0652	0.0764	86.66	81.56	[0.0764, 0.0944]
4	[0.0472, 0.0764]	0.0583	0.0652	85.9	86.66	[0.0472, 0.0583]
5	[0.0583, 0.0764]	0.0652	0.0695	86.66	87.0	[0.0583, 0.0652]

Después de 5 iteraciones, la solución óptima que se ha encontrado implica

$$x_1 = 0.0695$$

con lo cual

$$y_1 = 0.15$$
$$W = 870 \text{ lb/h}$$

y el valor de la función objetivo es

$$f = 87.0$$

Un mayor refinamiento de la solución ya no es posible por el tipo de información disponible para la relación termodinámica.

5.5 OTROS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN

El análisis de sistemas de optimización multivariables y de programación entera caen fuera del alcance de este libro; sin embargo, el lector que tenga algún interés en estos temas puede consultar las referencias que se recomiendan a continuación.

REFERENCIAS

Para un tratado general de métodos de optimización, pueden consultarse las siguientes referencias:

Beveridge, G. y R. Schlechter, *Optimization, Theory and Practice,* McGraw Hill (1970).
Reklaitis, G.V., A. Ravindran y K.M. Ragsdell, *Engineering Optimization. Methods and Applications,* John Wiley (1983).
Edgar, T.F. y D.M. Himmelblau, *Optimization of Chemical Processes,* McGraw Hill (1988).

La solución de problemas de programación lineal se presenta en:

Murty, K., *Linear and Combinatorial Programming,* John Wiley (1976).
Bazaara, M.S. y J.J. Jarvis, *Linear Programming and Network Flows,* John Wiley (1977).

Un buen tratado sobre métodos de programación no-lineal lo constituye:

Avriel, M., *Nonlinear Programming. Analysis and Methods,* Prentice-Hall (1976).

Una excelente referencia para métodos de programación entera es la siguiente:

Garfinkel, R.S. y G.L. Nemhauser, *Integer Programming,* John Wiley (1972).

PROBLEMAS

5.1 Considere el problema de extracción mostrado en el Ejemplo 5.3.

a) Si en vez de utilizar la función objetivo

$$\max\ [Q(x_F - x_1) - \lambda W]$$

se utiliza

$$\max\ [Q(x_F - x_1)]$$

obtenga el resultado óptimo. Interprete ese resultado.

b) Si ahora se utiliza la función objetivo

$$\min\ [\lambda W]$$

obtenga el nuevo punto óptimo y discuta el resultado.

5.2 Se va a diseñar un hervidor para una columna de destilación. Se ha determinado que la carga térmica a procesar es de 4×10^9 J/h, y que la temperatura de los fondos de la columna es de 200°C.

El costo del vapor para el hervidor está dado por:
$C_{vap} = -0.126 + 0.0136\ T$, $\$/10^9$ J [T en °C]

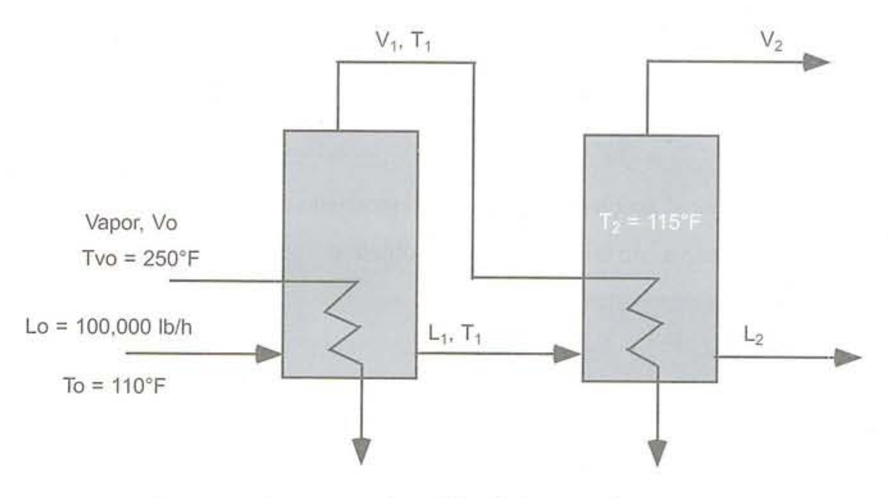
El costo del hervidor puede estimarse mediante:
$I_{her} = \$4120\ A^{0.65}$ [A en m^2]

El coeficiente de transferencia de calor es:
$U = 1.25\ MJ/m^2\ h\ °C$

Se ha estimado que la vida útil del hervidor es de 10 años, y que estará operando durante 8,500 h/año.

Se desea encontrar la temperatura que minimice el costo anual del hervidor (costo de servicios más costo anualizado de la inversión). Use el método de Sección Dorada para encontrar la temperatura óptima. Use un intervalo de búsqueda de 205 a 240°C.

5.3 Rudd y Watson han propuesto el siguiente caso para optimizar. Se desea concentrar agua de mar desde 3.5 a 7.0% en sales, con un flujo de 100,000 lb/hr en un sistema de evaporación de dos efectos (ver figura). Se dispone de vapor de agua a 250°F y el agua de mar entrará a 110°F. Para evitar la formación de depósitos salinos que ensuciarían la superficie de transmisión de calor, la temperatura en la última etapa debe mantenerse en 115°F.



Las ecuaciones para el modelo de la etapa i son:

$L_{i-1} = L_i + V_i$	Balance de materia
$V_{i-1}\lambda + L_{i-1}c_p(T_{i-1}-T_i) = V_i\lambda$	Balance de energía
$A_i = \dfrac{V_{i-1}\lambda_{i-1}}{U(T_{i-1}-T_i)}$	Ecuación de diseño

Datos: (constantes)

$c_p = 1$ BTU/lb °F
$\lambda = 1000$ BTU/lb
$U = 100$ BTU/h ft^2 °F

Determinar las áreas de transferencia de calor para los dos evaporadores que minimizan el consumo de vapor. De una interpretación al resultado que se obtiene.

5.4 Suponga que en el problema anterior se desean determinar las áreas de transferencia de calor que minimizan el costo del equipo, el cual está dado por la siguiente relación

$$C = 3.39\,[9{,}000\,(A/92.1)^{0.65}]$$

donde A debe estar en ft^2. Interprete el resultado.

5.5 Repita el ensayo del problema 5.4 con la restricción de que $A_1=A_2$. Al introducir una ecuación adicional en forma de restricción, debe liberarse una especificación para conservar el grado de libertad que permita optimizar el problema. Para este caso suponga que la restricción de la temperatura del segundo efecto no existe.

5.6 Para el problema 5.3, determine las áreas de transferencia de calor y el consumo de vapor que minimizan el costo total anual. El costo anual de vapor se estima mediante

$$C_{vapor} = 8500\, C_u Q$$

donde

C_u = 2.4 \$/millón kcal
Q = Calor suministrado mediante V_o, millón kcal/hr

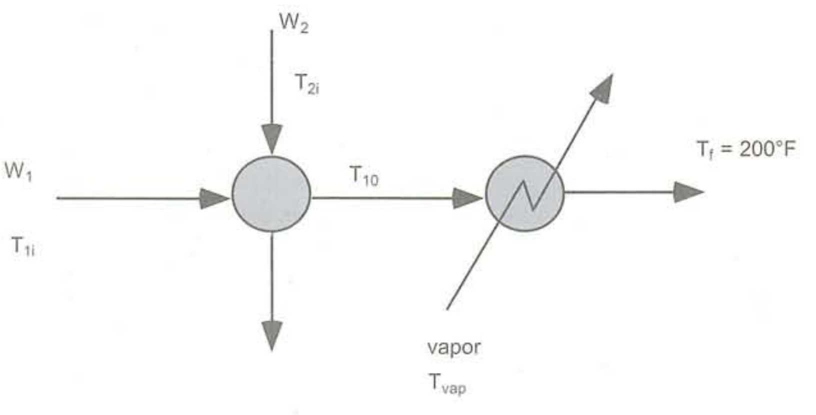
Suponga una vida del proyecto de 10 años.

5.7 Considere el siguiente esquema de intercambio de calor. Dos corrientes de proceso W_1 y W_2 intercambian calor en el equipo 1, y la corriente fría W_1 se envía a otro equipo 2, el cual es un calentador, donde se hace pasar vapor para calentar la corriente W_1 hasta una temperatura final de 200°F.

Datos:

W_1 = 1,000 lb/hr	W_2 = 500 lb/hr	T_f = 200°F
T_{1i} = 77°F	T_{2i} = 200°F	T_{vap} = 212°F
C_{p1} = 0.9 Btu/lb°F	C_{p2} = 1 Btu/lb°F	λ_{vap} = 1,000 Btu/lb

$U_1 = U_2 = U$ = 200 Btu/h ft² °F



Función objetivo:
Se desea minimizar el costo de operación anual del sistema,

$$Costo\ anual = \frac{Costo\ de\ los\ equipos}{n} + Costo\ anual\ de\ vapor$$

donde:

n = número de años = 10
Costo de equipo = 350 $(A)^{0.65}$, con el Área en ft²
Costo unitario de vapor = 5×10^{-3} \$/lb
Horas de operación al año = 8,500

Escriba los siguientes balances con ayuda del diagrama del proceso.

1) Cantidad de calor Q_1, en Btu/hr, que se transfiere en el intercambiador 1 debido a la corriente W_1.
2) Cantidad de calor Q_1, en Btu/hr, que se transfiere en el intercambiador 1 debido a la corriente W_2.
3) Ecuación de diseño para determinar el área del intercambiador 1, A_1. Puede usarse una diferencia de temperaturas promedio entre las corrientes en vez de usar la media logarítmica (por ejemplo, para la corriente W_1, usar una temperatura promedio de $(T_{1i} + T_{10})/2$).

4) Cantidad de calor Q_2, en Btu/hr, que se transfiere en el intercambiador 2 debido a la corriente W_1.
5) Cantidad de calor Q_2, en Btu/hr, que se transfiere en el intercambiador 2 debido al flujo de vapor.
6) Ecuación de diseño para determinar el área del intercambiador 2, A_2. Puede usarse un promedio de las temperaturas de la corriente W_1.

   Corrobore que existe un grado de libertad. Para proceder con la optimización, conviene escoger T_{10} como variable de búsqueda. Acote la búsqueda entre:

$$120°F < T_{10} < 170°F$$

7) Si se usa el método de Fibonacci, ¿a cuánto se reduce el intervalo original después de 4 iteraciones?
8) Si se usa el método de Fibonacci, escriba los valores del factor de reducción de espacio τ_i que se deben usar en cada iteración.
9) Use el método de Sección Dorada para encontrar el óptimo que minimiza el costo de operación anual. Use cuatro iteraciones de este método. Indique los mejores valores que se obtienen de las siguientes variables: A_1, A_2, w_{vap} y T_{10}.

5.8 El costo de tuberías, accesorios y bombas son costos importantes en una planta química. Considere el diseño de una tubería de longitud L que va a transportar un fluido a una razón de Q gpm. La selección de qué diámetro de tubería usar D (pulg) se basa en minimizar el costo anual de tubería, bomba y bombeo. Suponga que el costo anual de tubería de acero al carbón y una bomba centrífuga puede expresarse mediante

$$f = 0.45\ L + 0.245\ LD^{1.5} + 325\ (hp)^{0.5} + 61.6\ (hp)^{0.925} + 102$$

donde

$$hp = 4.4 \times 10^{-8}\ LQ^3/D^5 + 1.92 \times 10^{-9}\ LQ^{2.68}/d^{4.68}$$

Formule el problema de optimización para diseñar una tubería de 1000 ft de longitud con un caudal de 20 gpm. El diámetro de la tubería debe estar entre 0.25 y 6 pulg. Use el método de Fibonacci para su solución. Usando 6 iteraciones, ¿cuál es la reducción del intervalo que se logra? Estime el valor óptimo en esas condiciones.

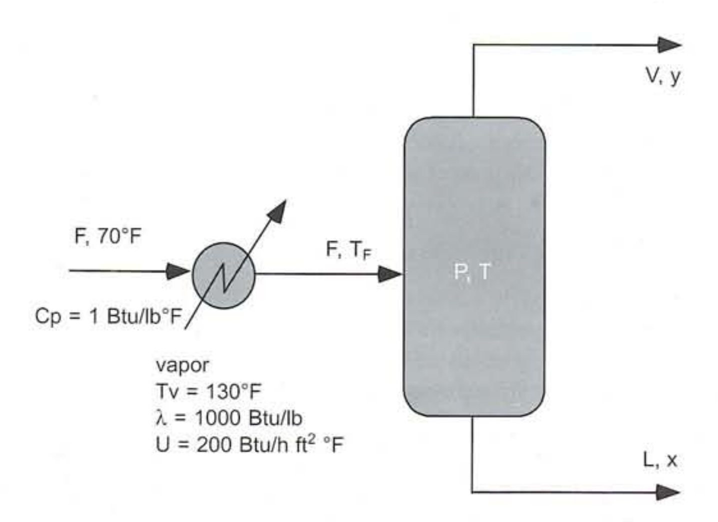
5.9 Considere el sistema mostrado en la figura, consistente de un intercambiador de calor seguido de un evaporador flash. Se desea procesar una alimentación de 1,000 libras/hora, con una concentración del componente volátil de 0.4. El producto superior del separador flash se va a vender, y su precio depende de la pureza de acuerdo con la siguiente tabla:

Pureza	0.4-0.49	0.5-0.59	0.6-0.69	0.7-0.79	0.8-1.0
Precio, $/lb	0.1	0.5	1.0	1.5	2.0

La relación de equilibrio para el componente ligero en el separador flash, a la presión de diseño, está dada por las siguientes expresiones en función de la temperatura de operación:

70-79°F	y = x
80-94°F	y = 1.5x
95-109°F	y = 2.0x
110-130°F	y = 2.5x

Para simplificar la solución numérica, suponga que la facción del componente pesado está dada por 1.0 menos la fracción del componente ligero.



El intercambiador de calor calienta la alimentación para lograr una mejor pureza en el separador flash y, por lo tanto, un mejor precio del producto. Para lograrlo, se consume vapor en el proceso de calentamiento. Se desean encontrar las condiciones de operación óptimas para este proceso, que satisfagan la siguiente función objetivo:

Maximizar [Ventas del producto-costo del vapor]

es decir

Maximizar [(V)(precio) – (w_{vap})(costo unitario)]

donde el costo unitario del vapor puede tomarse como 1 $/lb.

Notar que debido a la naturaleza de la función objetivo, no es necesario diseñar los equipos.

a) Escriba los balances necesarios para el intercambiador de calor.
b) Escriba los balances necesarios para el separador flash. En caso de escribir balances de energía, refiera todas las entalpías a un estado de referencia líquido a Tr.
c) Determine cuántos grados de libertad tiene el sistema.
d) Si se fuera a utilizar el método de Fibonacci, escriba los valores de τ que se deben usar si se fueran a utilizar 5 iteraciones. ¿Cuál es la reducción de intervalo que se lograría?
e) Utilizando el método de Sección Dorada, encuentre las condiciones de operación óptimas para el proceso utilizando cuatro iteraciones.

Como una aproximación, las entalpías de las corrientes para el separador flash pueden tomarse como constantes e igual a

$h_F = 20$ Btu/lb; $h_v = 100$ Btu/lb; $h_L = 10$ Btu/lb

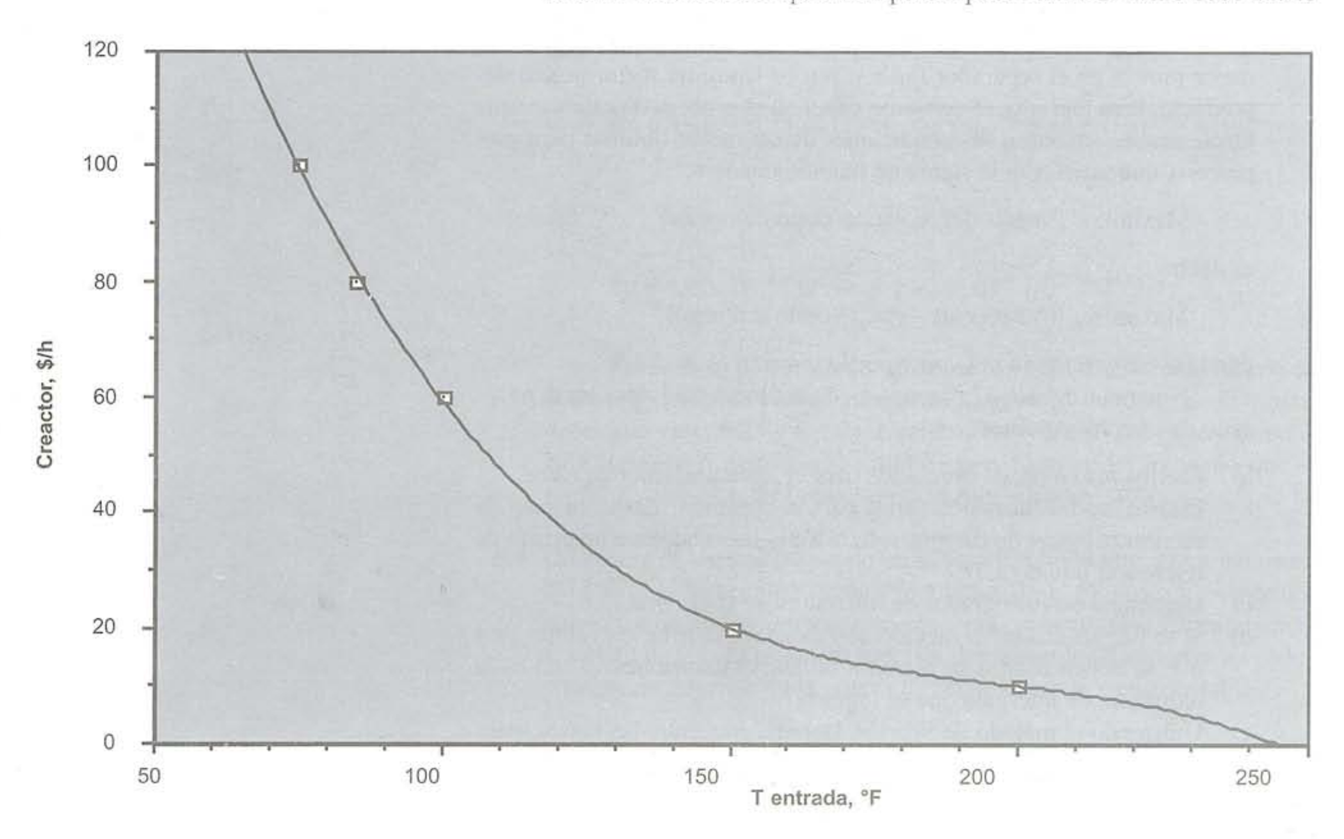
Recomendación: Analice con cuidado la información disponible para elegir una buena variable de búsqueda.

5.10 Un reactivo A, con un flujo de 1000 lb/h, va a ser alimentado a un reactor para generar un producto B. El flujo de reactivo, que se encuentra originalmente a 75°F, va a calentarse en un intercambiador de calor que usa vapor como medio de calentamiento antes de alimentarse al reactor. El incentivo de llevar a cabo este precalentamiento del reactivo es que el costo de operación del reactor disminuye en función de la temperatura de entrada de acuerdo a estimaciones ya disponibles, como se muestra en la figura anexa. Se desea encontrar la temperatura óptima de alimentación al reactor, tal que se minimice el costo total de operación definido por la suma del costo de vapor en el intercambiador más el costo de operación del reactor:

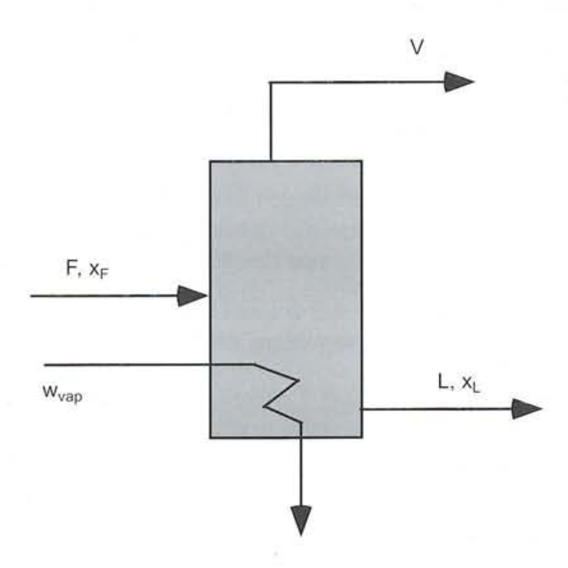
Minimizar [C vapor + C reactor]

La temperatura de entrada al reactor no debe exceder de 200°F para prevenir la descomposición térmica del reactivo. Usando Sección Dorada, estime el valor óptimo de la temperatura de alimentación al reactor. Use seis iteraciones del método.

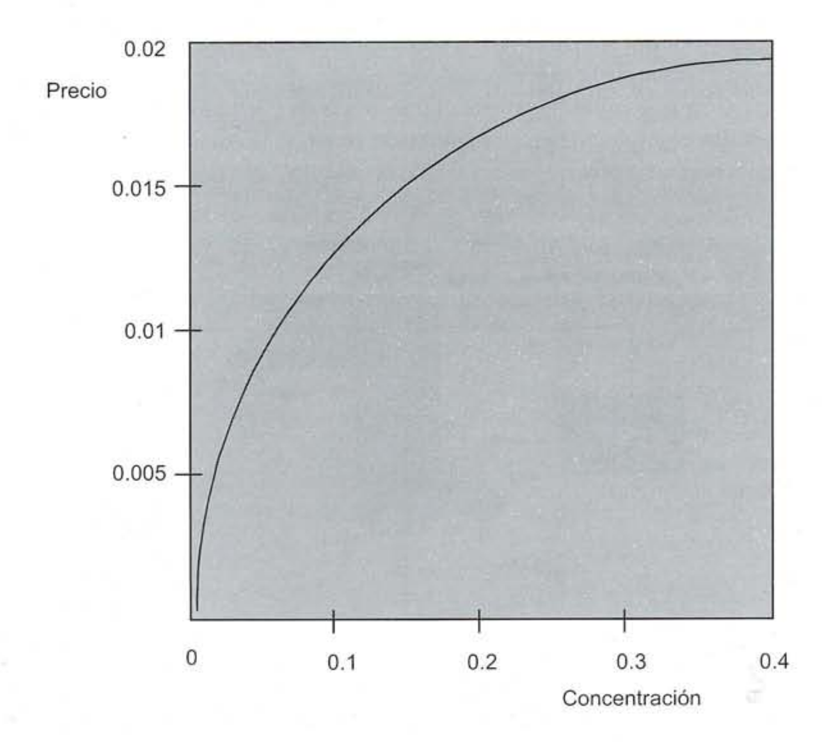
Datos: Costo de vapor = 1 $/lb
El Cp de cualquier compuesto puede tomarse como 1 Btu/lb °F
El calor latente de cualquier compuesto puede tomarse como 1000 Btu/lb



5.11 Se tiene un evaporador como el que se muestra en la figura:



Se desea concentrar una solución que tiene una concentración original de 0.05. El flujo de alimentación es de 1,000 lb/hr. La temperatura de alimentación es de 25°C y la temperatura del evaporador es de 100°C. El valor del producto depende de la concentración del soluto de acuerdo con la siguiente relación:



Para lograr un producto de mayor valor, debe consumirse una mayor cantidad de vapor, el cual tiene un costo unitario de 0.001 $/lb.

a) Escriba las ecuaciones de balance de materia que modelan el sistema.
b) Escriba el balance de energía para este proceso. Refiera todas las entalpías de las corrientes a un estado de referencia de líquido a 25°C.
c) Se desea optimizar este proceso de acuerdo a la siguiente función objetivo:

Máx [L * (precio) – w_{vapor} * (costo)]

Si se desea usar el método de Fibonacci para optimizar este problema, ¿cuáles serían los valores que deberían usarse en cada iteración si se deseara una reducción de tamaño de 10% del intervalo original?

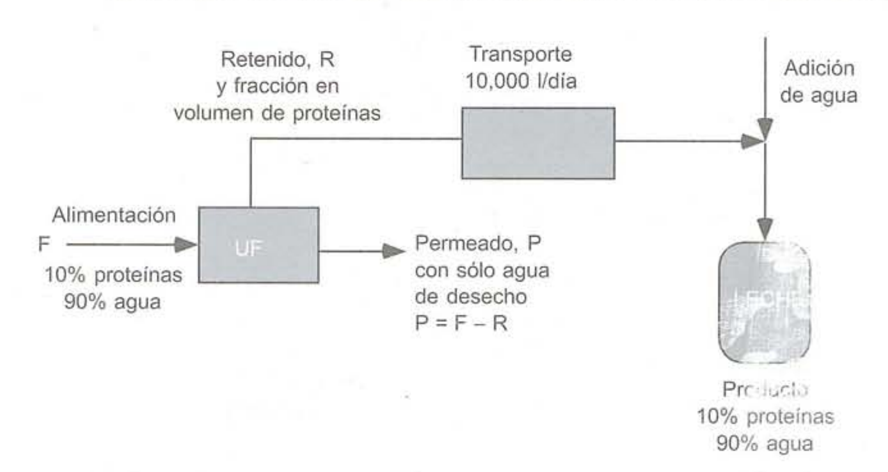
d) Aplique cuatro iteraciones del método de Sección Dorada y reporte la mejor solución que se obtiene después de esta búsqueda.

Suponga las siguientes propiedades termodinámicas como constantes en el intervalo de interés:

Entalpía de la alimentación:	0
Entalpía del producto de vapor:	1050 Btu/lb
Entalpía del producto líquido:	75 Btu/lb
Calor latente del vapor:	1000 Btu/lb

Note que esto simplifica el balance de energía.

5.12 Se cuenta con sólo un camión de 10,000 litros de capacidad que puede realizar una entrega de leche diariamente. Suponga que la composición de la leche contiene 10% en volumen de proteínas y que el resto puede considerarse como agua. Los gastos de transporte son elevados, a razón de $5,000 por día por camión. Debido a los altos costos de transporte, se propone concentrar la leche usando un proceso de ultrafiltración para eliminar el agua y evitar pagar por el transporte de esa cantidad de agua. Una vez que el producto llega a su punto de venta, se le adiciona la cantidad de agua necesaria para que su contenido de proteínas sea nuevamente del 10%.



El área de la membrana (A) se obtiene de acuerdo a su permeabilidad y el caudal de agua que se extrae (P):

$$P = (120\ l/m^2\ día)\ A$$

La función objetivo es la siguiente,

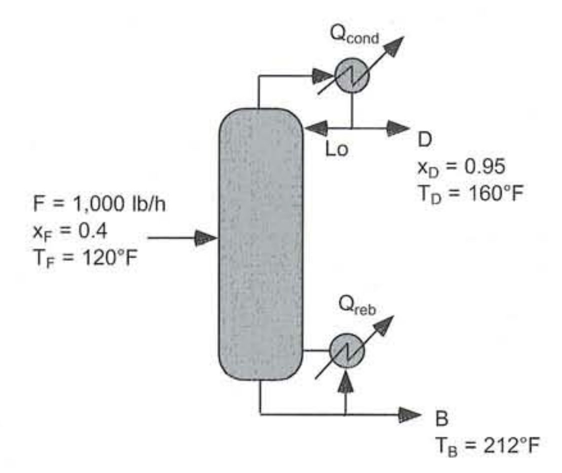
$$\max\left[1.15\frac{\$}{l}\times 10{,}000\frac{l}{día}\left(\frac{y}{0.1}\right)-5{,}000\frac{\$}{día}-\left(A\times 0.35\frac{\$}{m^2\ día}\right)^2\right]$$

donde el primer término corresponde a los ingresos por ventas, el segundo al costo del flete y el tercero al costo de separación. El valor de 1.15 \$/l representa el precio de venta de la leche antes de envasarse.

a) Establezca con claridad la interpretación del término 10,000 l/día (y/0.1) en la función objetivo.
b) Use el método de Sección Dorada para encontrar la concentración óptima, y*. ¿Cuál es la utilidad diaria?
c) ¿Cuál sería la utilidad diaria si no se concentrara la leche?

5.13 Se desea diseñar una columna de destilación para separar una mezcla binaria AC, la cual tiene una volatilidad relativa promedio α de 1.5. Se ha estimado que para esta separación la razón de reflujo mínima R_{min} es de 1.0, y que el número mínimo de etapas ideales $S_{mín}$ es de 5.

Para esta mezcla se tiene que el peso molecular de A es de 46 y el de C es de 18; el calor latente de cualquier mezcla de A y C puede tomarse como 900 Btu/lb, y la capacidad calorífica Cp como 1.0 Btu/lb°F. El flujo de alimentación es de 1,000 lb/h, con una fracción masa de 0.4 y una temperatura de 120°F; el destilado tiene una fracción masa de 0.95 y una temperatura de 160°F, mientras que los fondos tienen una fracción masa de 0.01 y una temperatura de 212°F. El siguiente diagrama ilustra los datos de la columna.



El vapor disponible para el hervidor tiene un calor latente de 1,000 Btu/lb.

a) Calcule los flujos de destilado y de fondos que se obtienen.
b) Escriba el balance de energía sobre el condensador para determinar la carga térmica del condensador, Qcond.

c) Escriba el balance de energía global que proporciona la carga térmica del hervidor, Qreb.

d) Si se quiere usar el método de Fibonacci para optimizar este diseño, escriba los valores de τ que deben usarse si se deseara resolver el problema con un total de 5 iteraciones. Estime la reducción del espacio de búsqueda que se logra después de esas 5 iteraciones.

e) El diseño del sistema depende del valor de la razón de reflujo, R = Lo/D. Para optimizar este sistema, se quiere obtener la razón de reflujo que proporciona el costo anual mínimo de la siguiente función objetivo:

Min (Costo de columna + costo de platos + costo de vapor)

donde los costos fijos deben pasarse a forma anual tomando 10 años como vida del proyecto. Se conoce que la razón de reflujo óptima está entre $R_{mín}$ y $2R_{mín}$. Use cuatro iteraciones del método de Sección Dorada para encontrar el valor de R que optimiza el sistema.

Datos de costos. Para fines de la solución de este problema, suponga que los costos pueden calcularse a partir de la siguiente información (ecuaciones apropiadas para el diseño y evaluación económica de columnas de destilación se tratarán en el Capítulo 8).

Costo fijo de la columna:

$$C_{col} = 10{,}000\left(\frac{S}{\eta}\right)^{0.5}$$

donde S es el número de platos ideales y η es la eficiencia de los platos, que puede tomarse como 0.8. El número de platos ideales S se calcula mediante la expresión:

$$\frac{S - S_{min}}{S + 1} = 0.5 - 0.5\left(\frac{R - R_{min}}{R + 1}\right)$$

donde R es la razón de reflujo, Lo/D.

Costo fijo de platos:

$$C_{platos} = 100\frac{S}{\eta}$$

Costo anual de vapor:

$$C_{vapor} = 10{,}000\ Q$$

donde Q es la carga térmica del hervidor en millones de Btu/h.

6

PROGRAMACIÓN DINÁMICA

6.1 El Principio de optimalidad de Bellman
6.2 Tipos de aplicaciones

El uso de la programación dinámica ofrece una forma conveniente de optimizar sistemas grandes que serían demasiado complicados para su estudio por métodos de optimización directos. Más que una técnica de optimización en sí, la programación dinámica consiste de una organización de la estructura de información de un sistema que permite su descomposición en susbsistemas más pequeños y más fáciles de analizar y optimizar. Cada subsistema, a su vez, puede requerir de un método de optimización específico; en un momento dado, la ventaja puede verse como la descomposición de un problema de optimización de multivariables a una serie de problemas de optimización de una sola variable (o de un número de variables menor al del problema original). Este método, por lo tanto, presenta el atractivo de poder manejar funciones no lineales o no analíticas de una manera efectiva. En general se puede decir que mediante programación dinámica se obtiene una secuencia óptima de decisiones. Para procesos químicos, esta técnica puede proporcionar el conjunto de variables de diseño que optimiza el comportamiento de un sistema completo de acuerdo a una determinada función objetivo.

6.1 El principio de optimalidad de Bellman

La programación dinámica se basa en el principio de optimalidad de Bellman, y se aplica a sistemas que no presentan reciclos en su flujo de información, es decir, a sistemas cuyos cálculos fluyen directamente de la primera a la última variable sin necesidad de reciclos en su proceso de solución. De esta manera, los cambios en alguna variable de diseño de alguna unidad sólo afectan a las unidades subsecuentes.

El principio de optimalidad de Bellman puede establecerse de la siguiente manera:

Dado un sistema acíclico, éste se optimiza si cada componente o unidad se optimiza a su vez para todo el conjunto de posibles valores de las variables que provienen de las etapas anteriores.

De acuerdo a este principio, un sistema se optimiza cuando para cada posible entrada que proviene del subsistema anterior se toma la mejor decisión que es posible a ese nivel, para lo cual podría requerirse de algún método de optimización explícito. Por lo tanto, el orden de aplicación de programación dinámica es el opuesto al del flujo de materiales en el proceso. Este concepto se muestra esquemáticamente en la Figura 6.1. El punto importante es que una decisión tomada sobre una etapa del proceso sólo afecta las unidades posteriores; la estructura acíclica del problema ocasiona que las unidades anteriores a la que se está analizando no son afectadas por las decisiones hechas a este nivel. De esta manera, la aplicación de esta técnica implica el analizar la última etapa primero para todo el conjunto de valores de las variables de entrada que puede recibir. En seguida se agrupan las dos entradas del final del diagrama y se con-

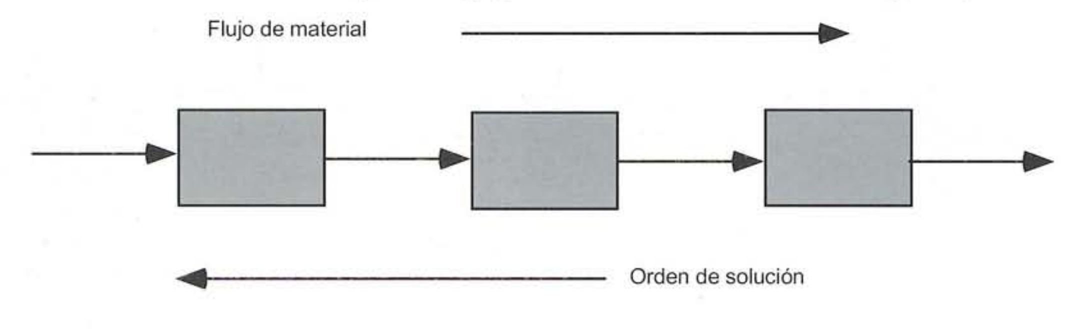


Figura 6.1
Uso de programación dinámica. El orden de solución es opuesto al flujo de material del proceso.

sideran las posibles entradas a este nuevo grupo de unidades. A este nivel, las soluciones que se tomaron sobre la última etapa se usan directamente en función de la salida que se obtenga de la penúltima etapa (calculada al resolver la penúltima unidad para cada posible valor de la corriente de entrada a esa unidad). El proceso de análsis se repite hasta llegar a la primera etapa del diagrama de flujo, que es la última a analizarse. Una vez concluido este proceso numérico, la solución óptima se obtiene fácilmente recuperando cada subóptimo de acuerdo al flujo de información del problema original.

6.2 Tipos de aplicaciones

Consideremos el caso general de un problema de optimización de diversas variables, cuya solución requiere de un algoritmo de optimización multivariable. La Figura 6.2 muestra el esquema de un sistema de este tipo para la aplicación de programación dinámica. Por conveniencia, las etapas se numeran en sentido inverso al del flujo de información, de tal manera que la primera etapa para el análisis es la última del diagrama de flujo. Para cada etapa, distinguimos un grupo de variables de estado, S, las cuales se obtienen de la solución del sistema de ecuaciones de esa unidad, y otro de variables de diseño, d. Debido a la descomposición del problema, el análisis individual de cada etapa en cuanto a sus grados de libertad sería igual a las variables de estado que llegan de la etapa anterior mas las variables de diseño. Los grados de libertad asociados con el primer tipo de variables se satisfacen al suponer sus valores (anticipando todo el intervalo que éstos pueden tomar) de acuerdo al principio de optimalidad de Bellman; al suponer estos valores los grados de libertad efectivos para cada etapa son los asociados con las variables de diseño d, sobre las cuales debe hacerse una búsqueda de optimización para cada valor supuesto de las variables de entrada.

Para discutir la aplicación de la técnica de programación dinámica al sistema de la Figura 6.2, consideremos inicialmente la última etapa del diagrama. La suboptimización de esta etapa implica la consideración de todos los posibles valores que provienen de la etapa anterior de acuerdo al flujo de información:

$$\max_{(d_1)} [f_1(S_2, d_1)] = f_1^*(S_2)$$

Los grados de libertad para esta etapa individual son los asociados con S_2 y d_1; los grados de libertad asociados con S_2 se consumen al suponer algún

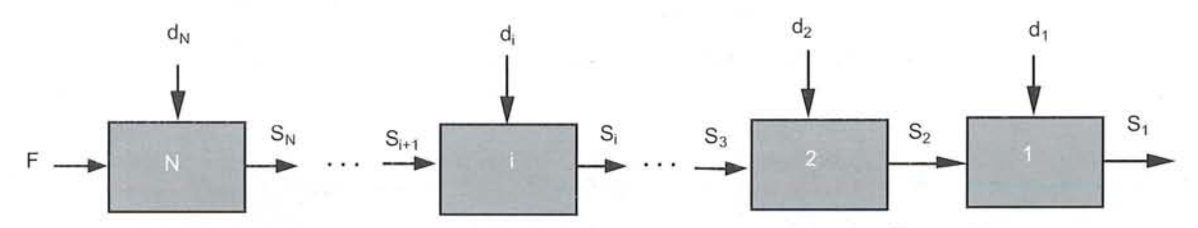


Figura 6.2
Estructura de un sistema acíclico en su flujo de información.

valor que esta variable pueda tomar, mientras que los grados de libertad asociados con d_1 permiten el uso de alguna técnica de optimización para encontrar su valor óptimo. Por lo tanto, cada subóptimo implica *el mejor valor que la variable de diseño d_1 debe tomar para cada posible valor de la variable de estado S_2 que proviene de la etapa anterior.* Este proceso de solución se muestra en la Figura 6.3.

A continuación se consideran las dos últimas etapas en conjunto. Para un dado valor de la corriente de entrada S_3, y algún valor de la variable de diseño d_2, la solución de ecuaciones del sistema debe proveer el valor correspondiente de salida de la unidad 2, S_2, y para cualquier valor de S_2 ya se ha obtenido cuál es la mejor variable de diseño para la unidad 1. Así, el problema

$$\max_{(d_2,\, d_1)} [f_2(S_3, d_2) + f_1(S_2, d_1)] = f_2^*(S_3)$$

se transforma en

$$\max_{(d_2)} [f_2(S_3, d_2) + f_1^*(S_2)]$$

Esta búsqueda debe repetirse para todos los posibles valores que S_3 pueda tomar, y cada subóptimo debe tabularse o graficarse apropiadamente, como se muestra en la Figura 6.4.

Este procedimiento se extiende de manera similar a las otras unidades que representan el proceso original. En general, para cualquier etapa i, el subproblema a resolver es

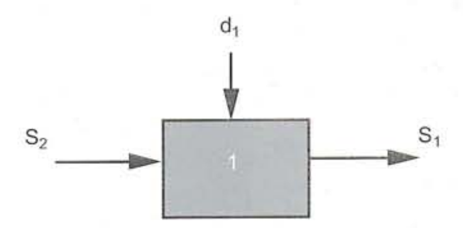
$$\max_{(d_i)} [f_i(S_{i+1}, d_i) + f_{i-1}^*(S_i)]$$

A este nivel todas las etapas subsecuentes ya se han analizadas, por lo cual el complemento a la estructura óptima depende sólo del valor que se obtenga de S_i. Finalmente, cuando $i = N$, la primera etapa del flujo de información, se tiene la última suboptimización a partir de la cual se recupera el plan óptimo global. En este nivel los grados de libertad del sistema son equivalentes al número de variables de diseño de la última etapa d_N, por lo cual se requiere de un solo proceso de búsqueda para optimizar esta última unidad. La solución global se recupera siguiendo el camino inverso al de la solución numérica que se ha planteado mediante esta técnica.

Aunque el proceso de solución se ha esquematizado para una variable de diseño para cada etapa, la extensión a problemas de optimización de multivariables para cada etapa es directa; en dado caso, el método particular de optimización debe escogerse adecuadamente, pero el uso de programación dinámica es equivalente.

En resumen, programación dinámica determina una secuencia óptima de decisiones. Podemos conceptualizar dos grandes casos para este tipo de problemas. Uno, cuando se trata de una secuencia de decisiones sin la necesidad de usar algún método de optimización explícito; en este caso, simplemente debe arreglarse el mejor orden de implementación de una serie de eventos discretos. El otro, cuando un modelo matemático de cada etapa de análisis contiene grados de libertad, los cuales deben satisfacerse mediante la aplicación de algún método formal de optimización. Mostramos un ejemplo ilustrativo de cada una de estas situaciones.

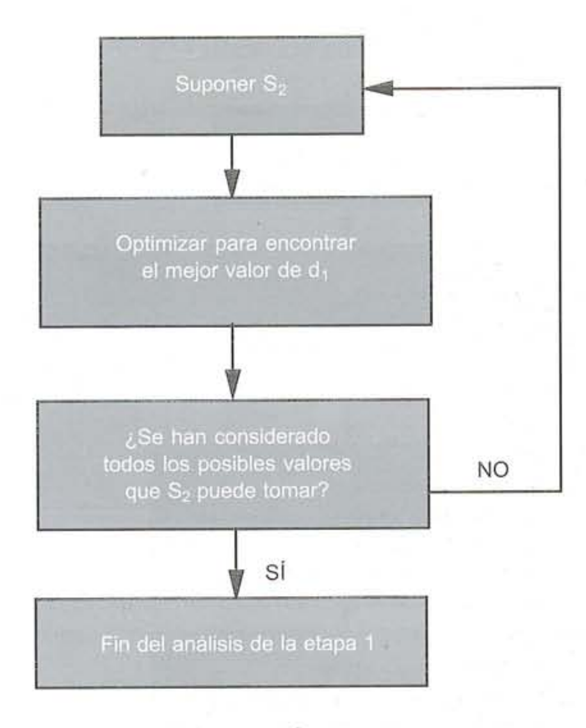
ESTRUCTURA



SUBPROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

$\text{Máx}[f_1(S_2,\ d_1)]$
(d_1)

ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN

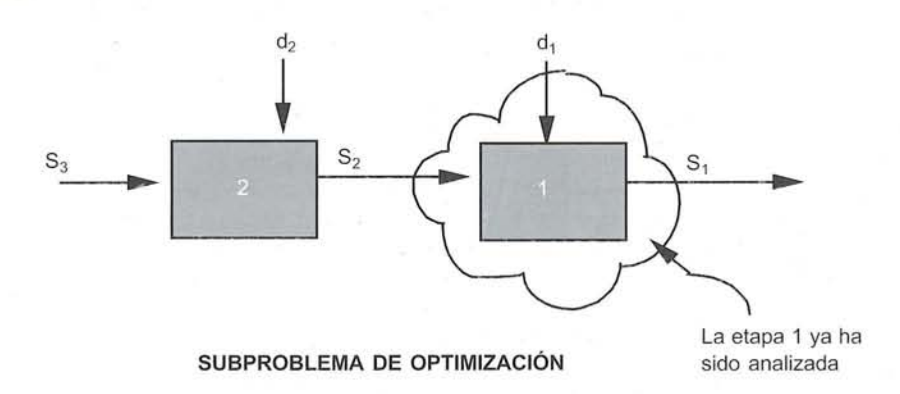


TABULACIÓN DE RESULTADOS

S_2	d_1^*	f_1^*
———	———	———
———	———	———
———	———	———

FIGURA 6.3
Análisis de la etapa 1.

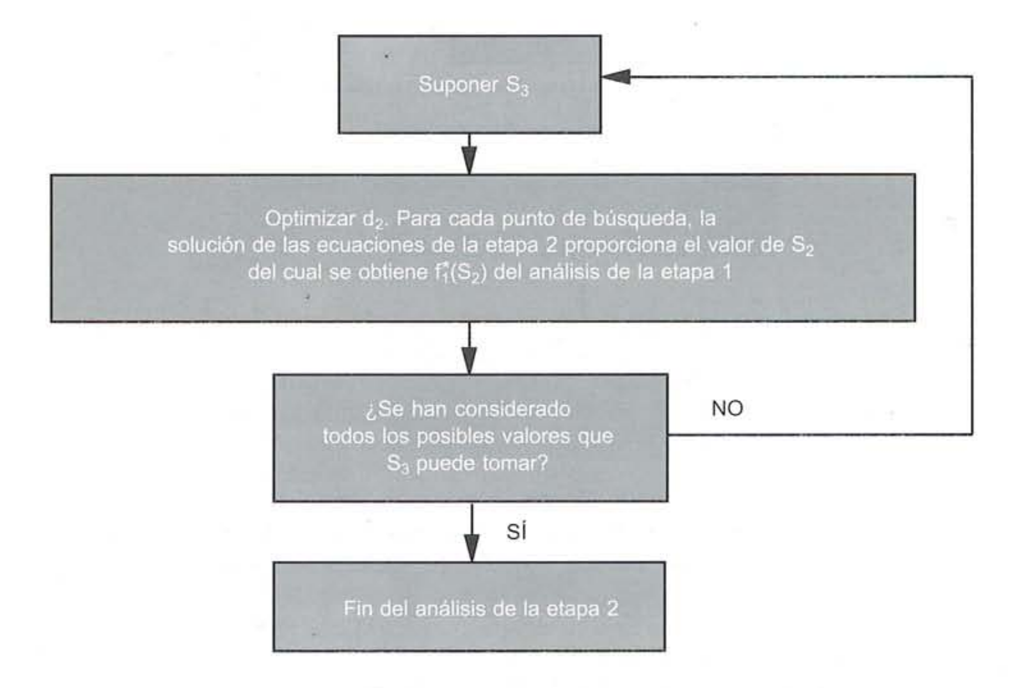
ESTRUCTURA



SUBPROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

$$\underset{(d_2)}{\text{Máx}}[f_2(S_3, d_2) + f_1^*(S_2)]$$

ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN



TABULACIÓN DE RESULTADOS

S_3	d_2^*	S_2	f_2^*

FIGURA 6.4
Análisis de las etapas 1 y 2.

Ejemplo 6.1

Se desea evaluar la siguiente operación industrial

⟶ Unidad 1 ⟶ Unidad 2 ⟶ Unidad 3

Para la unidad 1 se consideran dos tipos de unidades, A y B, que cuestan $100,000 y $200,0000 respectivamente. Los costos de operación de estas unidades dependen de la eficiencia a la que operan y son los siguientes:

	Costo de operación 10^3 $/mes	
Eficiencia, %	A	B
70	7	5
80	14	10
90	19	14

La operación de la unidad 2 está relacionada con la eficiencia de la unidad 1. Se está considerando un tipo de unidad que puede operar a tres temperaturas diferentes, 370°C, 400°C o 430°C, de acuerdo a los siguientes datos:

% eficiencia de la unidad 1	Costo, 10^3 $/mes 350°C	400°C	450°C
70	5	15	20
80	3	12	15
80	2	8	12
Costo fijo, 10^3 $	150	300	400

La unidad 3 está relacionada con la temperatura de la unidad 2, y las ventas anuales que se obtienen reflejan la mayor calidad de producto que se obtiene a mayor temperatura de operación de la unidad 2:

Temperatura, unidad 2, °C	Ventas de la unidad 3, 10^3 $/año
350	500
400	600
450	700

Determine la secuencia de operaciones óptima usando programación dinámica. Suponga para los costos fijos una depreciación lineal a 5 años.

Solución

Tomemos como base un año de operación, y encontremos la secuencia de decisiones que maximiza la utilidad bruta del sistema global. De acuerdo al principio de optimalidad de Bellman, el análisis debe comenzar por la última etapa del diagrama de flujo, en este caso la unidad 3. La última tabla del enunciado proporciona directamente el efecto de considerar todos los posibles valores de la variable de entrada a esa unidad, en este caso la temperatura a la que opera la unidad 2.

Unidades 2 + 3

En seguida se considera la penúltima unidad del diagrama, para lo cual se toman en cuenta los resultados de los óptimos locales obtenidos en la etapa anterior de solución. Debemos considerar todas las posibles entradas al sistema combinado que se analiza, en este caso todas las posibles eficiencias de la etapa anterior. La etapa 1 puede operar a eficiencias de 70, 80 o 90%. Por ejemplo, la utilidad anual que se espera al considerar una eficiencia de la unidad 1 de 70% a una temperatura de operación de 350°C es

$$500 - 5 \times 12 - 150/5 = 410 \text{ \$/año}$$

La siguiente tabla resume los cálculos pertinentes.

Eficiencia		Utilidades	
de unidad 1	350°C	400°C	450°C
70	410*	360	380
80	434	396	440*
80	446	444	476*

* Óptimos locales

Unidades 1 + 2 + 3

Consideramos por último la combinación de las tres unidades. Para cada eficiencia de la unidad 1 debe incorporarse el correspondiente valor del óptimo local que se determinó para la agrupación de las unidades 2 y 3. Por ejemplo, para una eficiencia de 70% y una unidad tipo A, la utilidad esperada es,

$$410 - 7 \times 12 - 100/5 = 306 \text{ \$/año}$$

donde el valor de 410 es el óptimo local de las utilidades que se había obtenido para valor de eficiencia de 70%. Los cálculos para la combinación de las tres unidades dan lugar a la siguiente tabla.

Eficiencia	Utilidad, \$/año A	B
70	306	310
80	252	280
90	228	268

De esta tabla se determina que las utilidades óptimas son de 310 \$/año, correspondientes a una secuencia de decisiones que implica que la unidad 1 es del tipo B y debe operar al 70% de eficiencia, y que la unidad 2 debe operar a 350°C.

Ejemplo 6.2

Para mosrar cómo programación dinámica determina el conjunto de variables de diseño que optimiza el comportamiento de un proceso global cuando existen grados de libertad explícitos en la modelación de un sistema, consideremos el problema de extracción que se mostró en el Ejemplo 5.3. Se extiende ahora el diseño a un sistema de extracción en tres etapas, como se muestra en la Figura 6.5. Para la concentración inical del soluto de $x_F = 0.20$ libras de soluto por libra de solvente, y el flujo de alimentación es Q = 1,000 libras de solvente por hora, optimizar el proceso de extracción de tres etapas usando programación dinámica. La función objetivo en este caso puede escribirse como:

$$\max_{\{W_1, W_2, W_3\}} [Q(x_F - x_1) - \lambda(W_1 + W_2 + W_3)]$$

donde $Q(x_F - x_1)$ representa la cantidad de soluto separado y λ es el costo unitario de solvente de lavado dividido por el valor unitario de soluto extraído. Considérese de nuevo que $\lambda = 0.05$.

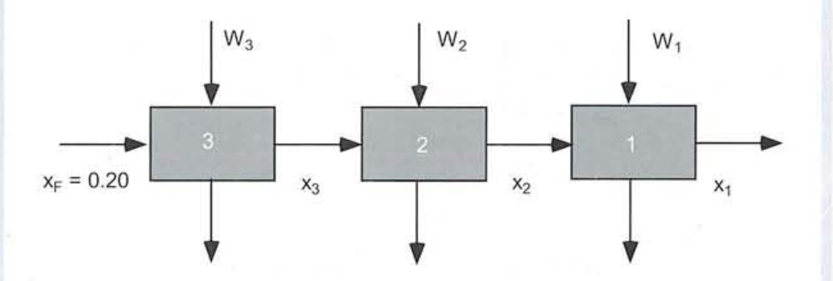


FIGURA 6.5
Sistema de extracción en tres etapas.

Solución

Establecer primero las relaciones de diseño para cada etapa.

Balances de materia

Total:

Suponiendo que los solventes no son inmiscibles,

$Q_{ent} = Q_{sal} = Q$

$W_{ent} = W_{sal} = W$

Soluto:

$Qx_{i+1} = Qx_i + Wy_i$

Relación de equilibrio

Está dada por la Figura 5.5.

$$\varnothing(x_i, y_i) = 0$$

Para cada extractor se tienen por lo tanto dos ecuaciones independientes y cinco variables (Q, W, x_{i+1}, x_i, y_i). De ellas, $Q = 1{,}000$ lb/hr, quedando por lo tanto dos grados de libertad para este sistema de ecuaciones. Sin embargo, x_{i+1} es una variable de estado que está especificada por la etapa anterior, con lo que se tiene que, para cada etapa, se debe optimizar el sistema con una variable de diseño.

Etapa 1

Aplicar el principio de optimalidad a esta etapa:

$$f_1^* = \max_{\{W_1\}} [Q(x_2 - x_1) - W_1\lambda]$$

donde

$$Qx_2 = Qx_1 + W_1y_1$$
$$\varnothing(x_1, y_1) = 0$$
$$Q = 1{,}000 \text{ lb/hr}$$
$$\lambda = 0.05$$

x_2 = valor especificado durante el proceso de búsqueda de programación dinámica, ya que proviene de la etapa anterior.

Para obtener los valores óptimos locales de esta etapa, conviene hacer la búsqueda sobre x_1 en vez de W_1, ya que el óptimo se puede acotar más fácilmente, y se facilita además la secuencia de cálculo.

El intervalo de búsqueda para x_1 está entre 0 y x_2, lo cual está restringido por la concentración de la alimentación de 0.20. Esto representa el espectro de todos los posibles valores que la alimentación a esta etapa, x_2, puede tomar (aplicación del principio de optimalidad). La Tabla 6.1 muestra la optimización del sistema para uno de los posibles valores que x_2 puede tomar, en particular $x_2 = 0.10$. El óptimo que se obtiene después de aplicar un método de búsqueda para ese valor de x_2 es de 30. De manera similar, se suponen otros valores para x_2 y los puntos óptimos obtenidos se resumen en la Tabla 6.2.

Tabla 6.1
Problema típico de suboptimización para el extractor 1 cuando $x_2 = 0.10$

x_1	W_1	$Q(x_2 - x_1) - 0.05W_1$	Comentarios
0.00	∞	$-\infty$	Límite inferior
0.10	0	0	Límite superior
0.03	1,000	20	
0.06	270	27	Eliminar 0.00-0.03
0.05	400	29	Eliminar 0.06-0.10
.	.	.	.
.	.	.	.
0.045	500	30	Valor óptimo. Pasarlo a la Tabla 6.2

Etapas 1 y 2

Considerar ahora los dos últimos componentes del sistema de extractores. La función objetivo es

$$f_2^* = \max_{\{W_1,\ W_2\}} [Q(x_3 - x_2) + Q\,(x_2 - x_1) - (W_1+W_2)\,\lambda]$$

Tabla 6.2
Cantidades óptimas de solvente para el extractor 1

x_2	x_1^*	W_1^*	f_1^*
0.03	0.024	83	1
0.04	0.027	171	3
0.05	0.030	254	6
0.06	0.036	274	10
0.07	0.038	342	14
0.08	0.040	394	19
0.09	0.043	437	24
0.10	0.045	500	30
0.11	0.045	584	35
0.12	0.046	641	40
0.13	0.049	682	46
0.14	0.051	724	52
0.15	0.053	759	58
0.16	0.055	788	64
0.17	0.057	841	70
0.18	0.059	878	77
0.19	0.059	929	83
0.20	0.060	1,000	90

A este nivel ya se ha analizado todo lo referente a la etapa 1 (la última del diagrama); por lo tanto, el problema se descompone en

$$f_2^* = \max_{\{W_2\}} [Q(x_3 - x_2) - W_2\lambda + f_2^*(x_2)]$$

con

$$Qx_3 = Qx_2 + W_2y_2$$
$$\phi(x_2, y_2) = 0$$

Para esta etapa, se asignan los posibles valores que x_3 puede tomar. Conviene de nuevo hacer la búsqueda de optimización sobre x_2 en vez de W_2 para cada valor supuesto de x_3. La Tabla 6.3 muestra el proceso de optimización para el caso en que $x_3 = 0.20$; el óptimo que se obtiene es de 120. En la Tabla 6.4 se resumen los resultados de la optimización de las dos etapas consideradas.

Tabla 6.3
Problema típico de suboptimización para el extractor 2 cuando $x_3 = 0.20$

x_2	W_2	f_1^* (de la Tabla 2)	$Q(x_3 - x_2) - \lambda W_2 + f_1^*$
0.00	∞	0	$-\infty$
0.20	0	90	90
0.08	730	19	101
0.12	450	40	98
0.10	590	30	100
.	.	.	.
.	.	.	.
0.076	775	—	102

Tabla 6.4
Cantidad de solvente óptimo para el sistema de dos extractores

x_3	x_2^*	W_2^*	f_2^*
0.03	0.026	56	1
0.04	0.031	104	4
0.05	0.037	139	8
0.06	0.041	181	13
0.07	0.044	227	18
0.08	0.047	278	24
0.09	0.053	284	29
0.10	0.057	311	36
0.11	0.059	357	42
0.12	0.060	427	48
0.13	0.064	447	55
0.14	0.067	486	62
0.15	0.067	553	68
0.17	0.075	588	82
0.18	0.075	650	89
0.19	0.075	714	95
0.20	0.076	775	102

Optimización de las tres etapas

Al considerar ahora las tres etapas llegamos a la solución del problema original, el cual, tomando en cuenta el análisis desarrollado para las dos últimas etapas del diagrama, se transforma en

$$\max_{\{W_3\}} [Q(x_F - x_3) - W_3\lambda + f_2^* (x_3)]$$

con las relaciones

$$ø(x_3, y_3) = 0$$
$$Qx_F = Qx_3 + W_3y_3$$

Como x_F está especificado, se tiene en esta etapa un solo problema de optimización. Usando por conveniencia x_3 en vez de W_3, se obtiene la búsqueda mostrada en la Tabla 6.5

La solución óptima implica $W_3 = 650$ lb/hr, con $x_3 = 0.09$. Para recuperar el plan óptimo global debemos ahora revisar el análisis que se desarrolló anteriormente para las otras etapas. La Tabla 6.4 se preparó al considerar los posibles valores que x_3 podía tomar; en particular, para $x_3 = 0.09$, la solución óptima requiere de $W_2 = 284$ lb/hr, con lo cual $x_2 = 0.053$. La Tabla 6.2 incluye las decisiones óptimas para el extractor 1 en función de x_2, de donde para $x_2 = 0.053$ se tiene que $W_1 = 260$ lb/hr.

Tabla 6.5
Búsqueda de la cantidad óptima de solvente para el extractor 3

x_3	W_3	$f_3^*(x_3)$	$Q(x_F - x_3) - \lambda W_3 + f_2^*$
0.00	∞	0	$-\infty$
0.20	0	102	102
0.08	730	24	108
0.12	450	48	105
.	.	.	.
.	.	.	.
0.09	650		108

En el ejemplo que se ha resuelto, el problema global implicaba un caso de optimización multivariable no lineal. Mediante programación dinámica, se ha descompuesto el problema en un conjunto de casos de optimización de una variable. A cambio de la simpleza del nuevo problema, el trabajo requerido es en ocasiones aún considerable, ya que es natural que la gran mayoría de las optimizaciones en cada etapa individual no forman parte de la solución óptima global. El compromiso entre estos dos conflictos debe ser adecuado para el uso de programación dinámica.

REFERENCIAS

El ejemplo de tres extractores apareció publicado en

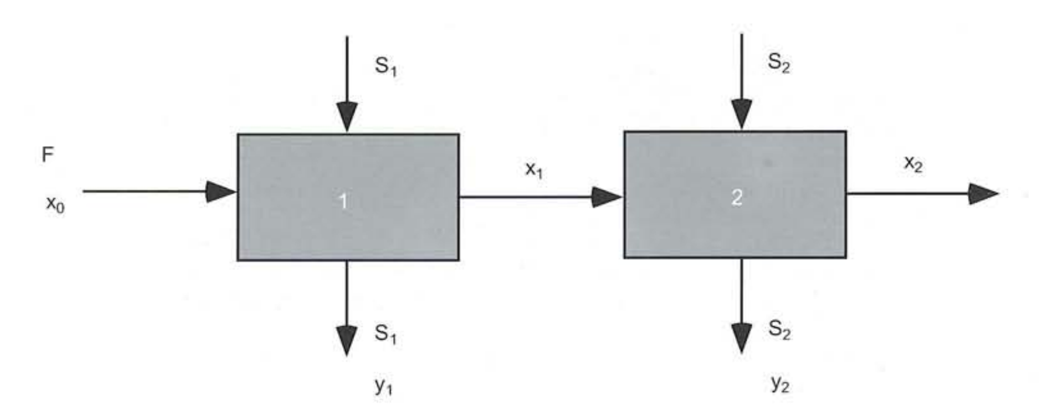
Rudd, D.F. y C.C. Watson, *Strategy of Process Engineering*, Wiley (1968).

Algunas aplicaciones de la técnica de programación dinámica en ingeniería química se pueden localizar en:

Kovasin, K.K., R.R. Hughes y C.G. Hill, Optimization of an Ultrafiltration-Diafiltration Process using Dynamic Programming, *Comp. Chem. Eng.*, 10, 2, 107 (1986).
Rhinehart, R.R. y J.D. Beasley, Dynamic Programming for Chemical Engineering Applications, *Chem. Eng.*, 113 (7 de diciembre de 1987).
Guntern, C., A.H. Keller y K. Hungerbühler, Economic Optimization of an Industrial Semibatch Reactor Applying Dynamic Programming, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 37, 4017 (1998).

PROBLEMAS

6.1 Optimice el siguiente sistema de extracción en dos etapas usando programación dinámica.



	Solvente 1	Solvente 2
Costo:	10 $/ton	5 $/ton
Equilibrio:	$y_1 = x_1$	$y_2 = x_2$

Datos de alimentación:
F = 100 tons
x_0 = 1 kg/ton F

Valor del producto: 1,000 e^{-x_2} $/ton F

Función objetivo:

Max (valor del producto-costo del solvente)
$\{S_1, S_2\}$

Usar los siguientes valores para x_1: 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5.

6.2 Un proceso consiste de tres equipos: un intercambiador de calor, un reactor químico y una columna de destilación. La alimentación original se precalienta en el intercambiador, se alimenta luego al reactor y la mezcla de reacción se separa finalmente en la columna de destilación. Existen varias posiblidades de operación y se desea encontrar la combinación que minimice el costo de operación del sistema.

El costo anual de la columna de destilación depende de la conversión que se logra en el reactor, y se puede estimar mediante el siguiente modelo reducido:

$$C_{separador} = \frac{1{,}000}{f_A}$$

donde f_A es la conversión obtenida del reactor. Se consideran tres posibles conversiones para la operación del reactor: 0.50, 0.75 y 0.90.

El costo de operación del reactor depende de la fracción de conversión producida y de la temperatura a la que se alimenta el flujo del reactivo, de acuerdo a la siguiente relación:

$$C_{reactor} = 500e^{f_A} + \frac{4{,}000}{T_{al}}$$

donde T_{al} es la temperatura de alimentación en grados centígrados.

El intercambiador de calor está considerado para precalentar la alimentación del reactor a tres posibles temperaturas: 25, 50 y 75°C. El costo de operación del intercambiador puede estimarse mediante el siguiente modelo:

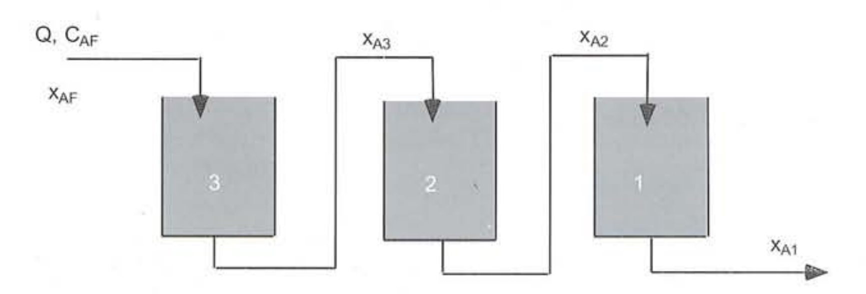
$$C_{Int} = \frac{1{,}000}{(100 - T)^{0.5}}$$

donde T es la temperatura de salida del intercambiador en grados centígrados.

Usando programación dinámica encuentre el arreglo óptimo para este diseño. Reporte el costo de operación mínimo y un pequeño diagrama de flujo donde se muestren las variables asociadas con esa solución óptima.

6.3 Considere el problema de extracción del Ejemplo 6.2. Extienda el problema a 4 unidades. Se requiere hacer en este caso una serie de suboptimizaciones para la segunda etapa del nuevo diagrama suponiendo los valores que la composición de la corriente de entrada, proveniente de la primera etapa del nuevo esquema (etapa 4 para fines de programación dinámica), puede tomar. Obtenga la solución óptima para este nuevo caso. Indique las cantidades óptimas de flujo de solvente de lavado en cada etapa, así como las composiciones de salida de cada etapa.

6.4 Considere el sistema de tres reactores continuos tipo tanque mostrados en la siguiente figura:



Se va a procesar en este sistema la reacción reversible $A \rightleftarrows B$. Para cualquier reactor i, un balance de materia proporciona la ecuación de diseño:

$$V_i = \frac{QC_{AF}(X_{A,i} - X_{A,i+1})}{-r_{A,i}}$$

donde Q es el flujo volumétrico, C_{AF} es la concentración inicial de A, $x_{A,i}$ es la conversión que se logra en el reactor i y $-r_{A,i}$ es la velocidad de reacción evaluada a las condiciones de salida del reactor i.

Para esta reacción, se tiene que la expresión cinética está dada mediante:

$$-r_A = k_{10} \exp(-E_1/RT)\, C_A - k_{20} \exp(-E_2/RT)\, C_B$$

donde C_A y C_B pueden expresarse en función de la conversión x_A.

Se conoce que Q = 1,000 l/hr y C_{AF} = 1 gmol/l, con $x_{AF} = 0$.

Para esta reacción,

$k_{10} = 3 \times 10^7\ \text{min}^{-1}$; E_1 = 11,600 cal/gmol °K;
$k_{20} = 2.4 \times 10^{19}\ \text{min}^{-1}$; E_2 = 29,500 cal/gmol °K.

Se desea llevar a cabo la reacción hasta un grado de conversión global de 0.9, de tal forma que el volumen total de los tres reactores se minimice, es decir

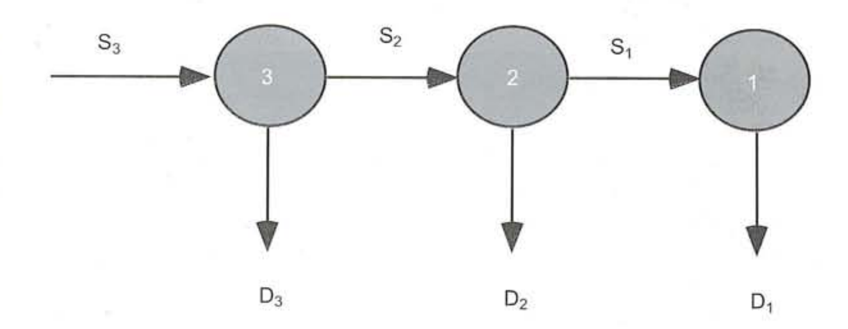
$$\underset{[T_1,\, T_2,\, T_3]}{\text{Min}}\ [V_1 + V_2 + V_3] \qquad \text{o bien} \qquad \underset{[x_{A1},\, x_{A2},\, x_{A3}]}{\text{Min}}\ [V_1 + V_2 + V_3]$$

Cada reactor puede diseñarse a una temperatura óptima que maximiza la velocidad de reacción para cada valor del grado de conversión que se tenga a la salida. Esta expresión de T en función de x_A puede obtenerse usando los principios de cálculo diferencial (diferenciando la ecuación de velocidad de reacción), lo cual proporciona una ecuación adicional para este diseño.

Usando programación dinámica, encuentre el diseño óptimo para este sistema de reacción.

Sugerencia: debe obtenerse una temperatura óptima para cada valor de conversión que se suponga proveniente de la etapa anterior; esta temperatura maximiza la velocidad de reacción para una conversión deseada a la salida. Compruebe cuidadosamente los grados de libertad en cada reactor individual para determinar en qué casos se requiere de un método de búsqueda adicional.

6.5 Considere el sistema de distribución de agua que se muestra en la siguiente figura.



Se desea procesar un flujo total de 3,000 m^3/hr. Este flujo se va a dividir en tres puntos de distribución para entregar las cantidades D_1, D_2 y D_3. El problema consiste en determinar la distribución de agua que genera la máxima ganancia para el sistema:

$$Maximizar\ f_N(S_N) = \sum_{i=1}^{N} f_i(S_i, D_i)$$

donde f_i es la ganancia de la etapa i. Valores para f_i para cada etapa se listan en la siguiente tabla:

D_i, m^3/hr	$f_1(D_1)$ \$	$f_2(D_2)$ \$	$f_3(D_3)$ \$
1,000	2,000	1,000	4,000
2,000	5,000	4,000	5,000
3,000	6,000	7,000	6,000

No se requiere explorar otros valores de D_i. Use programación dinámica y obtenga la distribución óptima de agua en los tres posibles puntos de entrega.

6.6 Un proceso consiste de un intercambiador de calor, seguido por un reactor químico y una columna de separación. En el intercambiador de calor, se calienta la materia prima A, que está originalmente a 25°C, y existen cuatro posibilidades que se consideran, de acuerdo a la siguiente tabla.

T salida, °C	Costo de operación, 10^6 \$/año
30	1.0
40	2.0
50	3.0
60	5.0

El reactor lleva a cabo la reacción $A \rightarrow B$, a un grado de conversión que depende de la temperatura de entrada:

T entrada, °C	Conversión
30	0.5
40	0.7
50	0.8
60	0.85

El costo de operación del reactor en todos los casos es de 1×10^6 \$/año.

Para la columna de separación, se consideran dos tipos de columnas. La columna tipo 1 tiene un costo de 1×10^6 \$, mientras que la columna tipo 2 cuesta 5×10^6 \$. Ambos equipos tienen una vida esperada de 10 años. La pureza que se obtiene al usar cada columna depende del grado de conversión que se obtiene de la etapa de reacción:

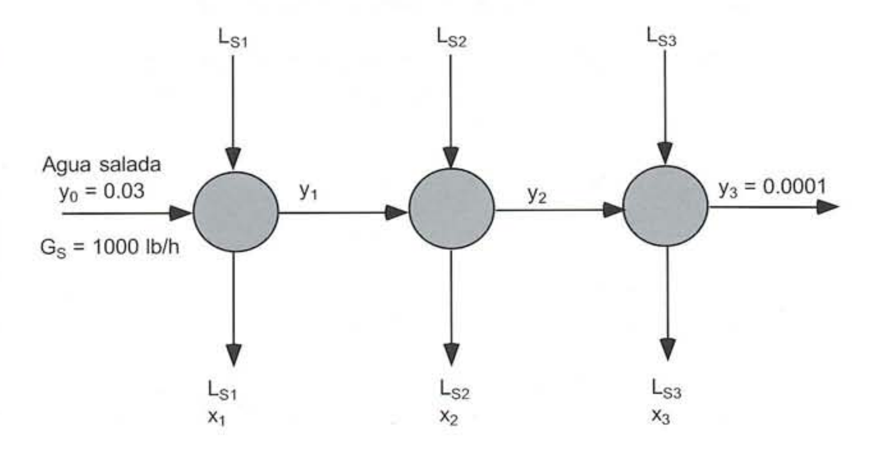
	Pureza	
Conversión	Col. tipo 1	Col. tipo 2
0.5	90	92
0.7	95	96
0.8	97	98
0.85	98	99

La siguiente tabla proporciona el precio de venta del producto en función de su pureza.

Pureza	90	92	95	96	97	98	99
Precio, \$/T	100	130	150	160	170	180	190

Si se desea producir 100,000 T/año de producto, detecte la estructura del proceso que maximiza la utilidad anual esperada utilizando programación dinámica.

6.7 Edgar y Himmelblan proponen la optimización de un nuevo método para desalinizar el agua de acuerdo al siguiente diagrama. La sal se adsorbe en un adsorbente sólido patentado en un proceso de tres etapas:



En el diagrama:
y_i = lb sal/lb H_2O en la corriente de agua
x_i = lb sal/lb adsorbente
L_{Si} = lb de adsorbente puro/hr

La relación de equilibrio que aplica en este caso sigue la ecuación de Freundlich:

$$y = x^2/100$$

Utilice programación dinámica para determinar la distribución del peso en libras por hora de disolvente puro L_{Si} que minimiza el número total de libras de adsorbente que se requieren por hora.

Recomendación: Compruebe cuidadosamente los grados de libertad en cada unidad. Para y_2 y y_1 use valores de 0.01, 0.008, 0.004, 0.001, 0.0008 y 0.0004 e interpole en caso de ser necesario.

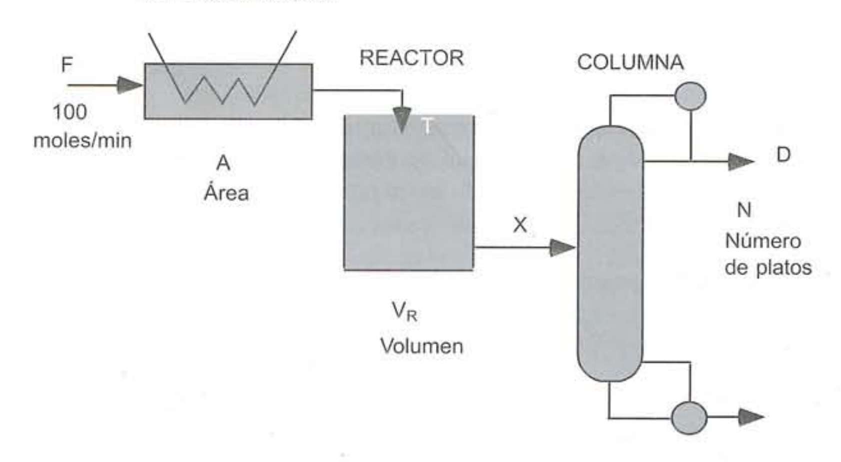
6.8 Se desea optimizar el proceso mostrado en la página 126.

En el diagrama, F es el flujo molar de alimentación, T es la temperatura de salida del intercambiador, X es la fracción de conversión a la salida del reactor, D es la pureza (fracción mol) del destilado, A es el área del intercambiador, V_R es el volumen del reactor y N es el número de platos de la columna de destilación.

La función objetivo es:

$$\text{Max } \{100X\,(0.1 + 0.2\,D) - 25\,A - 0.8\,V_R^{2.4} - 0.47\,N\}$$

donde el primer término representa las ventas, suponiendo que el precio de venta es función lineal de la pureza del producto, y el resto de los términos representan los costos del intercambiador, reactor y separador, respectivamente.



Las ecuaciones de diseño de los equipos son:

$A = (T - 25)/100$
$V_R = -\ln(1 - X)/k$

donde la constante de velocidad de reacción depende de la temperatura de acuerdo a la siguiente tabla:

T	k
25	0.4
50	0.6
100	1.0

y el número de platos está dado por,

$N = 10\,(X - X^2)\ln[1/(1 - D)]$

a) Demuestre mediante principios de cálculo que la pureza óptima en función de la conversión está dada por

$d^* = 0.765 + 0.235X$

b) Suponga valores de T de 25, 50 y 100, y encuentre las variables óptimas para cada uno de estos valores.

c) Indique cuáles son los valores óptimos de las variables de diseño de los equipos (A, V_R y N) y de las variables de operación (T, X y D), así como la utilidad óptima del proceso.

PARTE III

SÍNTESIS DE PROCESOS

7 SÍNTESIS DE PROCESOS

7.1 Etapas en ingeniería de procesos
7.2 Desarrollo de diagramas de flujo
7.3 Síntesis de sistemas de reacción

La etapa de síntesis de procesos implica la creación de alternativas para el desarrollo de diagramas de flujo que lleven a cabo una transformación deseada entre ciertas materias primas y productos químicos especificados. Estas alternativas deben irse comparando y evaluando en cada nivel de desarrollo bajo criterios económicos, además de otros aspectos que sean de relevancia tales como ecológicos, etc. En este capítulo comenzamos el análisis de la creación de procesos en busca de generación de alternativas, para ir en seguida aplicando criterios de evaluación que permitan identificar alguna buena alternativa, o bien aquella que cumpla con algún criterio de optimización. Situamos primero la ingerencia de la etapa de síntesis de procesos en el contexto del amplio campo de la ingeniería de procesos.

7.1 Etapas en ingeniería de procesos

Existen tres etapas fundamentales en ingeniería de procesos: síntesis, análisis y optimización.

La etapa de síntesis (o diseño) de un proceso implica el definir las entradas y salidas del sistema, en este caso las características de materias primas y productos deseados, y estipular la estructura del proceso que se requiere para llevar a cabo la transformación deseada de los reactivos a productos. Esta situación se esquematiza en la Figura 7.1.

La etapa de análisis (o simulación) de un proceso consiste en definir las entradas o materias primas y el diagrama de flujo del proceso para indagar las salidas que se pueden obtener, como se muestra en la Figura 7.2.

Debe ser claro que cada solución al problema original de la síntesis de un proceso implica un nuevo problema de análisis del proceso; una vez que se define el diagrama de flujo del problema original, se plantea el análisis o simulación de este proceso para establecer las salidas que se obtienen y compararlas con las que se habían estipulado originalmente.

En la optimización de un proceso, una vez que se agotan los grados de libertad en forma de variables de diseño, se plantea una función objetivo que trata de minimizar algún tipo de entradas o costos del proceso, o bien de maximizar algún tipo de salidas o beneficios del proceso, para en función de este objetivo obtener las mejores variables de diseño (Figura 7.3).

De nuevo, existe una interrelación entre esta etapa y las otras dos de ingeniería de procesos. La solución al problema de síntesis puede auxiliarse me-

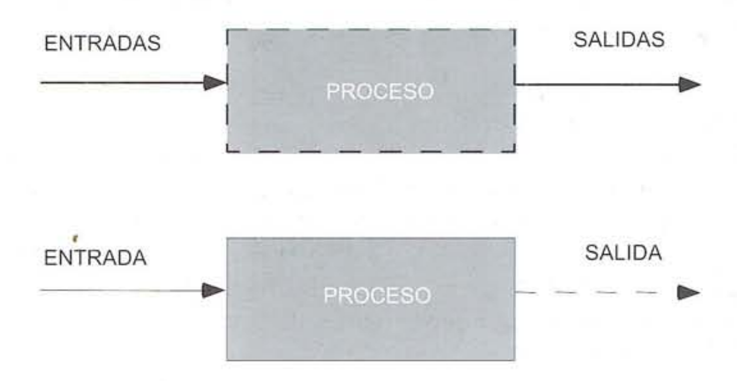


FIGURA 7.1
Síntesis de procesos.

FIGURA 7.2
Análisis de procesos.



FIGURA 7.3
Optimización de procesos.

diante alguna técnica de optimización, y cada punto de búsqueda del proceso de optimización puede implicar la simulación del proceso bajo ese conjunto particular de condiciones de operación que se están explorando en busca de la solución óptima.

7.2 Desarrollo de diagramas de flujo

La transformación de materias primas disponibles en productos deseados comienza a conceptualizarse mediante el desarrollo de un diagrama de flujo del proceso que se está diseñando. Para llevar a cabo esta transformación, podemos dividir la estrategia global en las siguientes etapas:

1) Definir las reacciones involucradas
2) Establecer la distribución de especies
3) Diseñar los sistemas de separación
4) Diseñar sistemas con integración de energía
5) Incorporar criterios de seguridad de procesos
6) Analizar los aspectos ecológicos pertinentes

El objetivo de la primera etapa es llenar con reacciones químicas el camino entre la entrada y la salida del sistema. Esto define inicialmente el número de reactores que constituyen la parte fundamental del proceso.

Para detectar las reacciones necesarias se requiere de una búsqueda bibliográfica. La recopilación debe incluir las condiciones de la reacción, uso de catalizadores, grados de conversión, etc. Esto implica que las reacciones ya se han explorado experimentalmente y que en un momento dado forman parte, o pueden llegar a hacerlo, de un ambiente industrial.

La distribución de especies establece las conexiones primarias entre los reactores; la materia prima de alguno de ellos puede ser el producto de otro de los reactores, lo cual establece el orden de los equipos de reacción en el diagrama de flujo.

La distribución de especies proporciona también las necesidades de separación de componentes, debido a que comúnmente la corriente de salida de un reactor tiene componentes adicionales a los requeridos en otro reactor subsecuente, y a que los productos del proceso requieren altos grados de pureza.

El aspecto económico del sistema se mejora al aprovechar la energía de las corrientes disponibles en el proceso, con el objeto de reducir el consumo de energéticos en forma de servicios (vapor y agua de enfriamiento). Para esto, es conveniente pensar en el diseño de redes de intercambiadores de calor a partir de las corrientes involucradas en el proceso.

En muchos casos, los aspectos de seguridad son esenciales y deben incorporarse desde la creación del proceso. Casos de notable importancia son aquellos en donde la posible interacción de dos compuestos presentes en el proceso producirían situaciones explosivas. El diagrama de flujo que se diseña debe asegurar que ello no ocurra; la incorporación de estrategias de control toman un papel fundamental para lograr este objetivo.

El deterioro del medio ambiente en el mundo ha sido muy notable y cada vez son más notorios los esfuerzos por corregir y prevenir el aumento de la contaminación ambiental. Se requiere asegurar que el proceso maneja adecuadamente sus deshechos sin un daño ecológico. Esto ha dado pie al desarrollo de procesos conocidos como tecnologías limpias, lo que hoy en día constituye un requisito fundamental en la creación de nuevos procesos.

Los puntos anteriores pueden resolverse en ocasiones en forma secuencial para finalmente integrarse en un diagrama de flujo. Pueden también conceptualizarse métodos de síntesis de procesos que cumplan con varias de las etapas anteriores mediante algún método de inteligencia artificial o de optimización global.

Ejemplo 7.1 Producción de Cloruro de Vinilo

El cloruro de vinilo es un monómero que se usa principalmente para la producción de policloruro de vinilo. La producción de cloruro de vinilo puede hacerse a través de la siguientes reacciones:

C_2H_4	+	Cl_2	$\rightarrow$	$C_2H_4Cl_2$
(etileno)		(cloro)		(dicloroetano)
$C_2H_4Cl_2$ $\rightarrow$		C_2H_3Cl	+	HCl
(dicloroetano)		(cloruro de vinilo)		(ácido clorhídrico)

El ácido clorhídrico podría además usarse para regenerar parte del cloro que se consume en la primera reacción,

2HCl	+	1/2 O_2 $\rightarrow$	Cl_2	+	H_2O
(ácido clorhídrico)		(oxígeno)	(cloro)		(agua)

Tomando en cuenta sólo las primeras dos reacciones, el proceso requiere dos reactores, y el producto del primer reactor proporciona el reactivo necesario para al segundo. Debido a que las reacciones químicas no son completas, se requiere de sistemas de separación después de cada reactor. Estos sistemas de separación están aún por definirse, pero en este nivel se establece la necesidad específica de diseño, o sea se establecen las entradas y las salidas de cada sistema de separación. Esta necesidad de purificar compuestos químicos es típica de la mayoría de los procesos, lo cual hace recomendable el hacer énfasis en el diseño de sistemas de separación. La Figura 7.4 muestra un bosquejo del diagrama de flujo que a este nivel es posible conceptualizar usando las dos primeras reacciones. Si incorporamos la tercera reac-

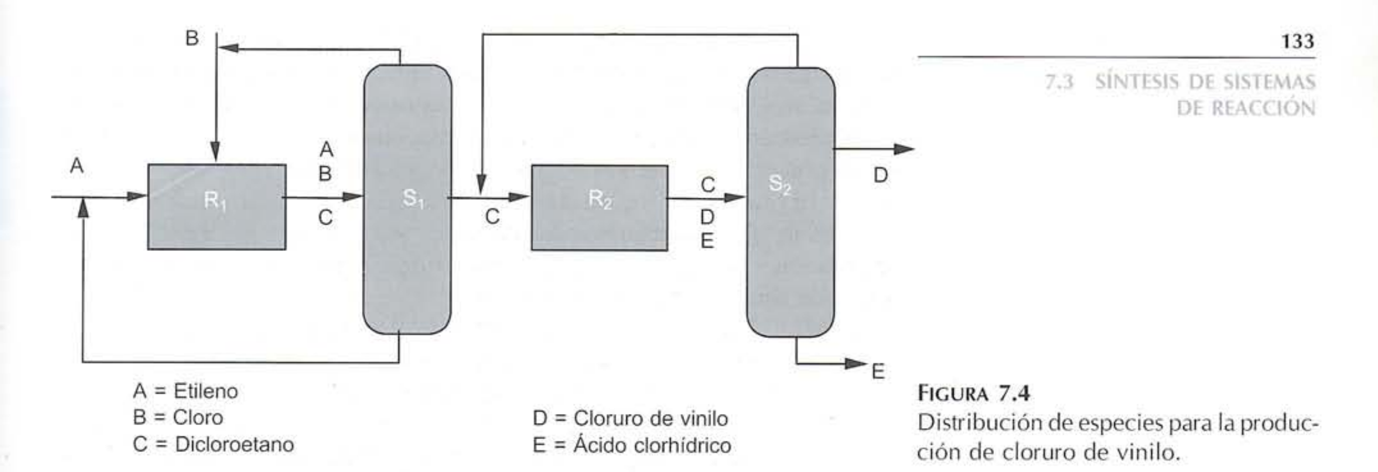


FIGURA 7.4
Distribución de especies para la producción de cloruro de vinilo.

ción para producir una alternativa adicional, el diagrama requiere expandirse para incluir otro reactor, y un análisis económico donde se compare el ahorro obtenido mediante la disminución del consumo neto de cloro contra el aumento en la inversión y en el costo de operación de los sistemas de reacción y separación, darían la pauta sobre la conveniencia de una alternativa sobre la otra. Mediante principios similares pueden generarse este tipo de diagramas de flujo preliminares basados en alternativas de sistemas de reacción hacia un producto específico.

7.3 Síntesis de sistemas de reacción

En algunas ocasiones, alguna materia prima barata y muy disponible puede considerarse como precursora de algún producto valioso, pero al analizar la viabilidad de esa reacción no siempre se encuentra que se pueda llevar a cabo, al menos en condiciones de operación posibles en la práctica. La siguiente reacción para la producción de carbonato de sodio es un ejemplo de este caso:

$$2NaCl + CaCO_3 \rightarrow Na_2CO_3 + CaCl_2$$

Aunque esta reacción ofrece un potencial económico interesante, no es posible llevarla a cabo en forma directa, lo cual se refleja en un análisis termodinámico desfavorable. Ernest Solvay descubrió en 1860 un conjunto de reacciones cuyo efecto global es la transformación de cloruro de sodio y carbonato de calcio en carbonato de sodio y cloruro de calcio:

$$CaCO_3 = CaO + CO_2 \ (1{,}000°C)$$
$$CaO + H_2O = Ca(OH)_2 \ (100°C)$$
$$Ca(OH)_2 + 2NH_4Cl = CaCl_2 + 2NH_3 + 2H_2O \ (120°C)$$
$$2NH_3 + 2H_2O + 2CO_2 = 2NH_4HCO_3 \ (60°C)$$
$$2NH_4HCO_3 + 2NaCl = 2NaHCO_3 + 2NH_4Cl \ (60°C)$$
$$2NaHCO_3 = Na_2CO_3 + H_2O + CO_2 \ (200°C)$$

Cada reacción de este conjunto se lleva a cabo a las condiciones especificadas. Existen otros procesos industriales basados en este principio, los cuales tienen un efecto global equivalente a una reacción originalmente imposible; estos procesos se han desarrollado en forma empírica, sin una guía sistemática para generar una secuencia de reacciones adecuada.

El proceso Solvay establece un incentivo para buscar una manera sistemática de generar conjuntos de reacciones con un efecto similar. Existen tres condiciones para que un conjunto de reacciones tenga el potencial de comercialización similar al del proceso Solvay:

1. Las reacciones deben ser estequiométricamente consistentes. Todos los productos intermedios deben ser producidos y consumidos dentro de la misma red de reacciones.
2. Cada reacción debe ser termodinámicamente factible. Se considera que este criterio se cumple si el cambio de la energía libre de Gibbs para la reacción es menor que 10,000 cal/gmol.
3. Las reacciones deben tener una cinética apropiada.

En el método que aquí se presenta, se garantizan los primeros dos requisitos. Obviamente, si la termodinámica no es factible, el tercer punto carece de valor.

El concepto de la diferencia común

Considérese una reacción imposible

$$A + B \rightarrow Z$$

para la cual se cumple por lo tanto que

$$\Delta G > \varepsilon$$

donde ε es el límite termodinámico de factibilidad para una reacción química. Esta reacción puede sustituirse por un conjunto de reacciones factibles

$$\begin{aligned} A + L &= N \\ N + B &= Z + L \end{aligned}$$

cuyo efecto global es la reacción original. Estas dos reacciones tienen la característica de que para cada una de ellas

$$\Delta G < \varepsilon$$

Rearreglando el sistema de reacciones,

$$\begin{aligned} Z - B &= A \\ A &= N - L \\ Z - B &= N - L \end{aligned}$$

El significado de estas nuevas relaciones se aclarará más delante. Por lo pronto, consideremos las relaciones de energía libre de Gibbs para este conjunto de reacciones:

$$\Delta G_{neta} = G_Z - (G_A + G_B) > \varepsilon$$
$$\Delta G_1 = G_N - (G_A + G_L) < \varepsilon$$
$$\Delta G_2 = (G_L + G_Z) - (G_N + G_B) < \varepsilon$$

lo cual se desprende de la definición que se ha dado a cada reacción en cuanto a su factibilidad termodinámica; esto implica que

$G_Z - G_B > G_A + \varepsilon$ para cualquier condición
$G_N - G_L < G_A + \varepsilon$ para condiciones (1)
$G_Z - G_B < G_N - G_L + \varepsilon$ para condiciones (2)

El diagrama mostrado en la Figura 7.5 establece las características de la energía libre de Gibbs en función de la temperatura para la reacción global. La distancia entre las dos rectas en cualquier punto excede el valor de ε, puesto que la reacción es termodinámicamente imposible.

Si se agrega al diagrama anterior la energía libre de Gibbs de N − L, se tiene un comportamiento como el que se muestra en la Figura 7.6. Cada segmento del diagrama proviene de la descomposición que se ha desarrollado para las reacciones originales. Cada miembro de esas ecuaciones resultantes, generalmente en forma de diferencias, puede conceptualizarse como una *mitad de una reacción*, la cual carece de significado en forma aislada, pero que la unión de dos segmentos de este tipo define una reacción factible. Estas mitades de reacciones potenciales establecen la base para el concepto de la diferencia común:

	Reacción	Diferencia Común
Neta	A + B = Z	Z − B = A
(1)	A + L = N	N − L = A
(2)	B + N = L + Z	N − L = Z − B = A

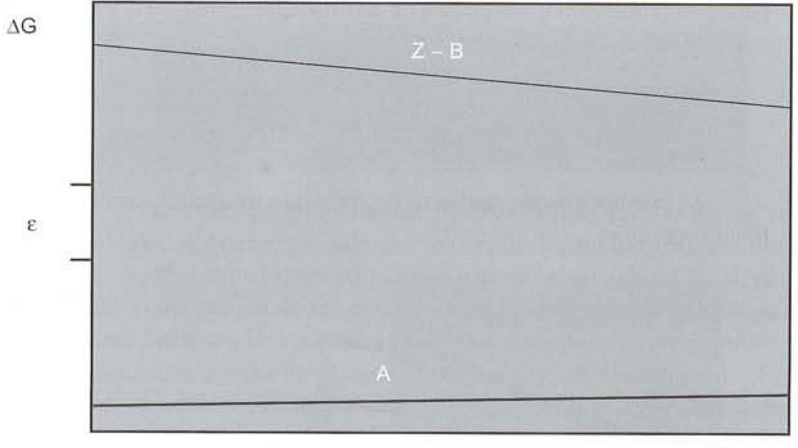


FIGURA 7.5
Diagrama de energía libre de Gibbs para una reacción termodinámicamente imposible.

FIGURA 7.6
Diagrama de energía libre de Gibbs incorporando una reacción termodinámicamente factible.

El procedimiento para la síntesis de reacciones implica el establecer un componente de la reacción original como diferencia común, y generar en seguida un grupo de mitades de reacciones que tengan la misma diferencia común. Se pasa esta información a un diagrama de energía libre de Gibbs contra temperatura y se identifican las medias reacciones potenciales que tengan una diferencia menor o igual a ε hasta llenar el camino entre las líneas que identifican a las dos mitades de reacción del sistema original, las cuales están separadas por una distancia mayor que ε para todo el intervalo de temperaturas.

Ejemplo 7.2 Descomposición del ácido clorhídrico

Considérese la siguiente reacción imposible:

$$2HCl = H_2 + Cl_2$$

El diagrama de la Figura 7.7 representa un diagrama de energía libre de Gibbs contra la temperatura, para un rango de 300°K a 1500°K, para esta reacción descompuesta en dos mitades, $2HCl - H_2$ y Cl_2, lo cual sugiere usar el cloro como diferencia común:

$$2HCl - H_2 = Cl_2$$

Se pueden generar varias reacciones que tengan Cl_2 como diferencia común:

$$COCl_2 - CO = Cl_2$$
$$2CrCl_4 - 2CrCl_3 = Cl_2$$
$$2FeCl_3 - 2FeCl_2 = Cl_2$$
$$CrCl_4 - CrCl_2 = Cl_2$$
$$2MnCl_4 - 2MnCl_3 = Cl_2$$

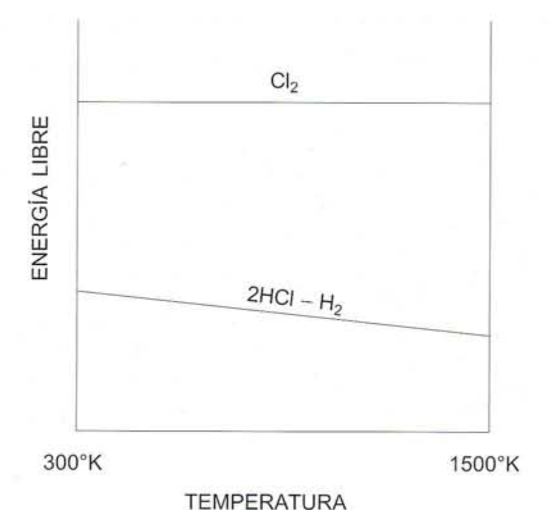


FIGURA 7.7
Diagrama de energía libre de Gibbs en función de temperatura para la descomposición del HCl.

$CuCl_2 - Cu = Cl_2$
$HgCl_2 - Hg = Cl_2$
$1/2\ MnCl_4 - 1/2\ MnCl_3 = Cl_2$
$2CrCl_3 - 2CrCl_2 = Cl_2$
$2CuCl - 2Cu = Cl_2$
$PbCl_2 - Pb = Cl_2$

La Figura 7.8 muestra el diagrama resultante. De las Figuras 7.9 y 7.10 se identifican dos posibles conjuntos de reacciones que generan la reacción global de interés. A partir de la Figura 7.9 se obtiene el siguiente esquema de mitades de reacción:

$2HCl - H_2 = 2(CrCl_3 - CrCl_2)$
$2(CrCl_3 - CrCl_2) = 2(MnCl_4 - MnCl_3)$
$2(MnCl_4 - MnCl_3) = Cl_2$

Esto da lugar al siguiente esquema de reacciones cuyo efecto global es la descomposición del HCl en H_2 y Cl_2:

$2HCl + 2\ CrCl_2 = 2CrCl_3 + H_2$ (410 – 790°K)
$2CrCl_3 + 2MnCl_3 = 2MnCl_4 + 2CrCl_2$ (930 – 1350°K)
$2MnCl_4 = 2MnCl_3 + Cl_2$ (300 – 550°K; 1350 – 1500°K)

El intervalo de temperaturas observado para cada reacción se obtiene del diagrama, notando los valores de T para los cuales la distancia vertical entre las rectas es igual o menor que 10 Kcal/gmol, por lo cual a esos rangos de temperatura las reacciones son termodinámicamente factibles. De manera similar puede encontrarse otro conjunto de reacciones a partir del diagrama que se muestra en la Figura 7.10. Se deja al lector el escribir ese conjunto de reacciones como ejercicio.

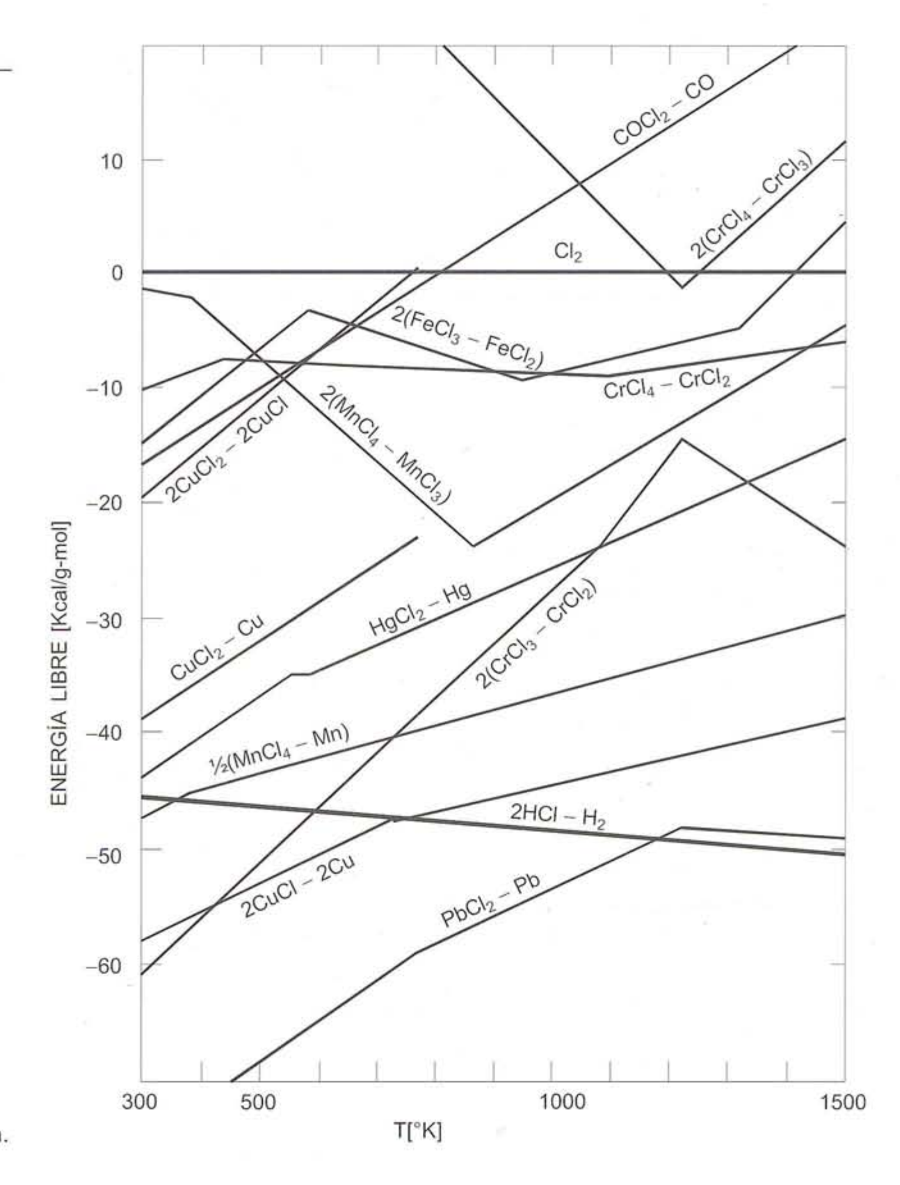


FIGURA 7.8
Uso del cloro como diferencia común.

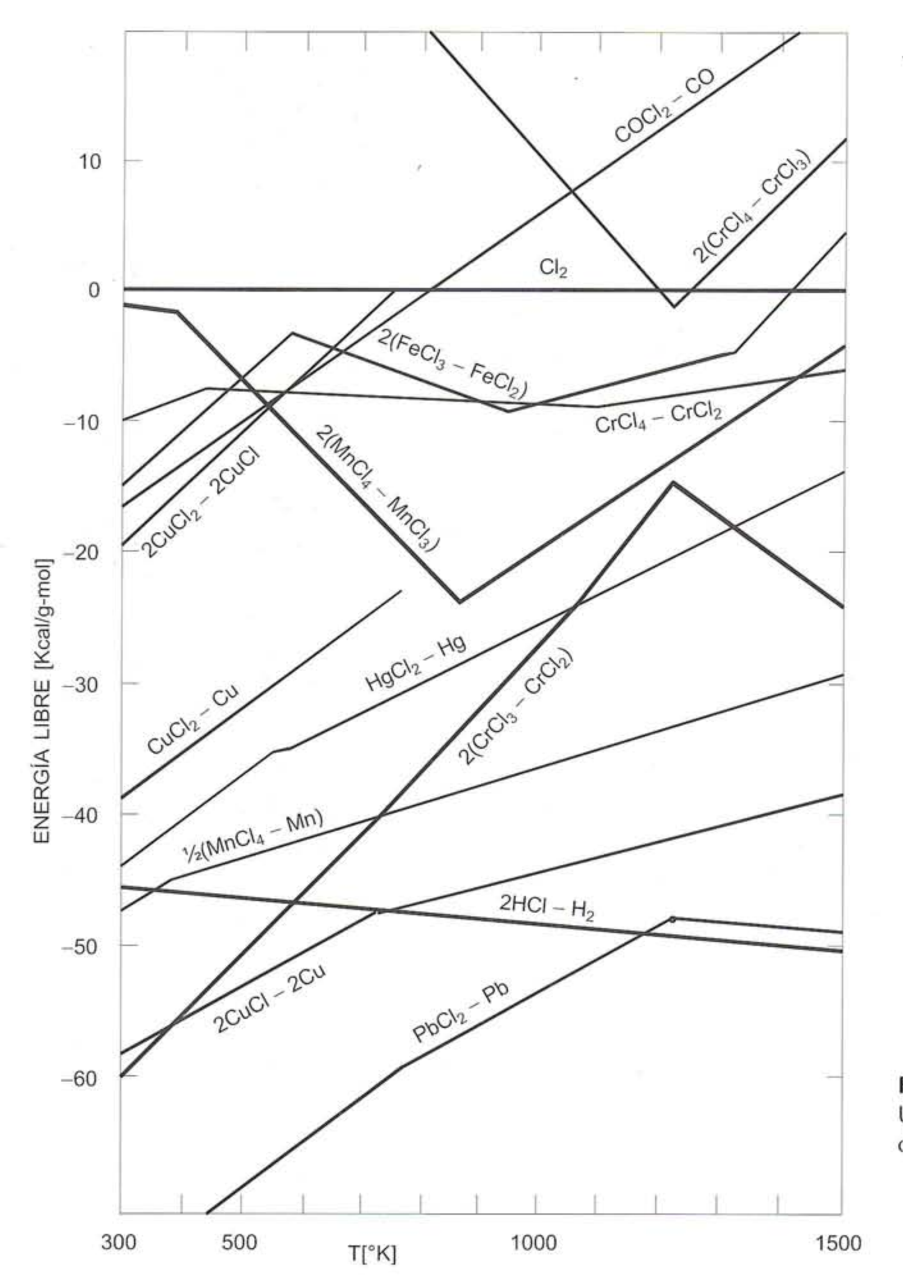


FIGURA 7.9
Un conjunto de reacciones para la descomposición del HCl.

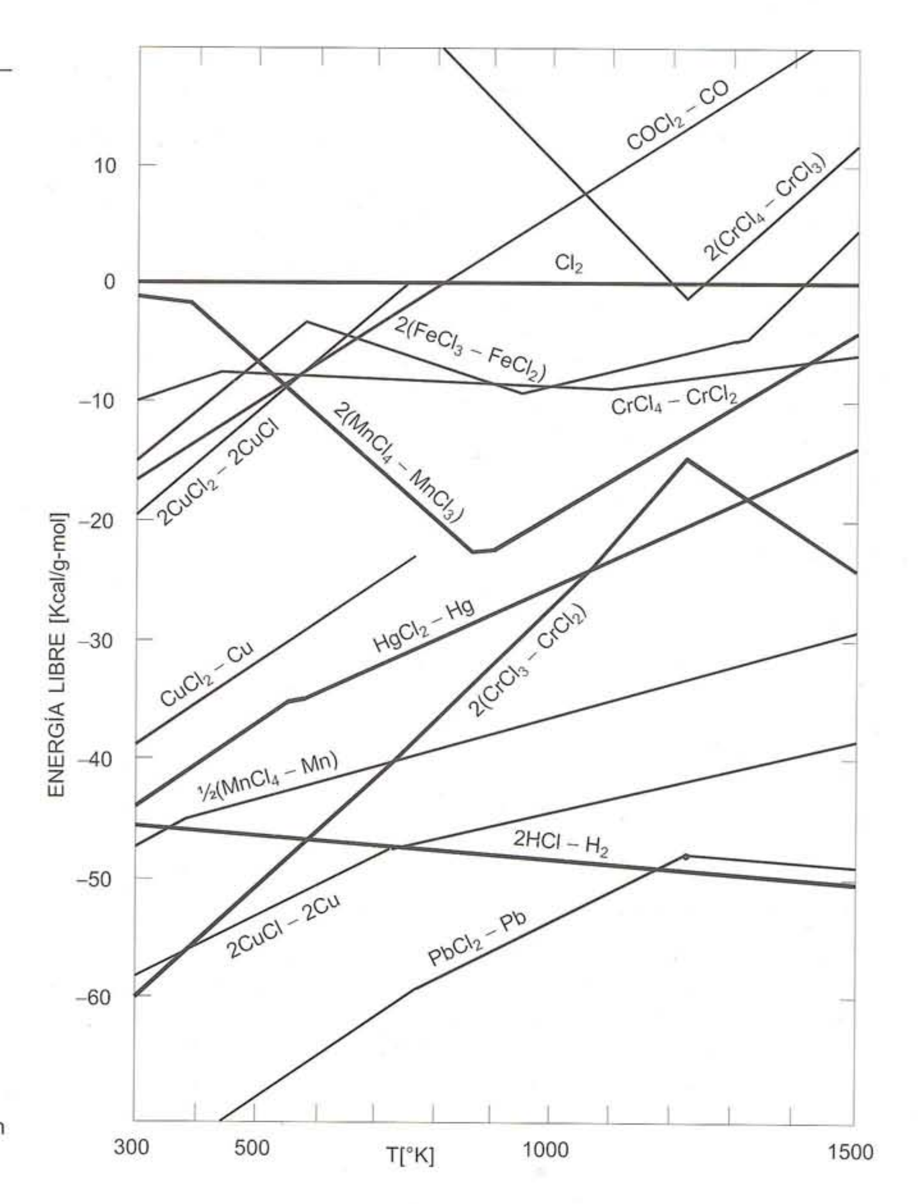


FIGURA 7.10
Otra alternativa para la descomposición del HCl.

Para mayor detalle sobre las etapas de síntesis de procesos, se puede consultar:

Rudd, D.F., G.J. Powers y J.J. Siirola, *Process Synthesis*, Prentice Hall (1973).

El método de síntesis de sistemas de reacción tipo Solvay se presenta en el siguiente artículo:

May, D. y D.F. Rudd, "Development of Solvay Clusters of Chemical Reactions", *Chemical Engineering Science*, 31, 59 (1976).

PROBLEMAS

7.1 Una posible ruta para producir cloruro de vinilo implica tres reacciones químicas:

Cloración directa:
$C_2H_4 + Cl_2 \rightarrow C_2H_4Cl_2$

Oxicloración:
$C_2H_4 + 2HCl_2 + 1/2\ O_2 \rightarrow C_2H_4Cl_2 + H_2O$

Pirólisis del dicloroetano
$2C_2H_4Cl_2 \rightarrow 2C_2H_3Cl + 2HCl$

a) Indique cuál es la reacción global para este proceso. Compare esta reacción global con la del Ejemplo 7.1. ¿Existe alguna ventaja potencial de este proceso sobre el del Ejemplo 7.1?
b) Desarrolle un diagrama de flujo preliminar, detectando la distribución de especies y las necesidades de los sistemas de separación.

7.2 James D. Idol condujo una investigación en 1957 con un minirreactor de lecho fluidizado de 1 ft de altura y 2 ft de diámetro, usando un catalizador de fosfomolibdato de bismuto, en el cual alimentó propileno, amoniaco y aire para obtener acrilonitrilo como producto:

$$C_3H_6 + NH_3 + 3/2O_2 \rightarrow C_3H_3N + 3H_2O$$

Acrilonitrilo es la base para la producción de fibras orlon, hules sintéticos y varios otros productos poliméricos. Las rutas de reacciones para obtener acrilonitrilo en la época de esta investigación eran las siguientes.

Usando acetileno y ácido cianhídrico:

$$C_2H_2 + HCN \rightarrow C_3H_3N$$

Reacción entre el óxido de etileno y el ácido cianhídrico:

$$C_2H_2O + HCN \rightarrow C_3H_3N + H_2O$$

Idol obtuvo un premio por su innovación. Basándose en los precios de reactivos y productos, indique el efecto que la reacción de Idol tuvo en la economía de la manufactura de acrilonitrilo.

7.3 La producción de fenol puede lograrse usando varias rutas de reacciones como base. En seguida se establecen cinco formas en que puede producirse fenol a partir de diferentes materias primas.

1. Proceso de sulfonación. Benceno reacciona con ácido sulfúrico para formar ácido benceno-sulfónico.

$$C_6H_6 + H_2SO_4 \rightarrow C_6H_5SO_3H + H_2O$$

A condiciones drásticas de hidróxido de sodio fundido (por encima de 300°C), el ácido producido se convierte en óxido fenólico de sodio. Esta masa fundida se trata con agua, y se filtra el sulfito de sodio.

$$C_6H_5SO_3H + 3NaOH \rightarrow C_6H_5ONa + Na_2SO_3 + 2H_2O$$

Bajo condiciones ácidas, el óxido fenólico de sodio se convierte en fenol.

$$C_6H_5ONa + CO_2 + H_2O \rightarrow C_6H_5OH + NaHCO_3$$

2. Proceso de clorobenceno. En una solución de hidróxido de sodio a 5000 psi y 350°C, el clorobenceno se convierte en óxido fenólico de sodio.

$$C_6H_5Cl + 2NaOH \rightarrow C_6H_5ONa + NaCl + H_2O$$

El óxido se acidifica para formar fenol.

$$C_6H_5ONa + HCl \rightarrow C_6H_5OH + NaCl$$

3. Proceso catalítico. En fase de vapor, a 200°C, benceno reacciona catalíticamente con ácido clorhídrico para producir clorobenceno.

$$C_6H_6 + HCl + 1/2O_2 \rightarrow C_6H_5Cl + H_2O$$

El clorobenceno se convierte a fenol en reacción en fase de vapor, a 500°C y usando un catalizador de C/Cu-Fe.

$$C_6H_5Cl + H_2O \rightarrow C_6H_5OH + HCl$$

4. Proceso de oxidación de tolueno. Usando sales de cobalto como catalizador, tolueno puede oxidarse parcialmente a ácido benzoico como producto intermedio, que en presencia de catalizadores de sales de cobre y magnesio puede oxidarse para producir fenol y dióxido de carbono.

$$C_6H_5CH_3 + O_2 \rightarrow C_6H_5COOH + H_2O$$
$$C_6H_5COOH + O_2 \rightarrow C_6H_5OH + CO_2$$

5. Proceso basado en cumeno. Este proceso comienza con la oxidación en fase vapor de cumeno para producir hidroperóxido de cumeno, seguido de una reacción de acidificación para formar fenol y acetona.

$$C_6H_5C_3H_7 + O_2 \rightarrow C_6H_5\ C_3H_6\ O_2H$$
$$C_6H_5\ C_3H_6\ O_2H \rightarrow C_6H_5OH + C_3H_6O$$

a) Suponiendo que sólo existe mercado para el fenol, determine cuáles rutas son potencialmente factibles a esta primera etapa de desarrollo hacia un proceso comercial. Consulte alguna fuente de precios como el *Chemical Marketing Reporter*.
b) Si algún subproducto parece tener mercado potencial, incorpore esta variable en el análisis del inciso anterior.
c) Basado en su análisis económico preliminar y en un análisis cualitativo de las posibles implicaciones de cada ruta, indique cuál (o cuáles) de ellas parece tener el mejor potencial.

7.4 Se están considerando las siguientes tres reacciones para la manufactura de fenol.

$$C_6H_6 + Cl_2 \rightarrow C_6H_5Cl + HCl$$

Comentarios: Clorobenceno producido mediante reacción a 60°C y 3 atm, con un 90% de conversión.

$$C_6H_5Cl + NaOH + 2\ H_2O \rightarrow C_6H_5ONa + NaCl + 2\ H_2O$$

Comentarios: Reacción ocurre a 360°C y 400 atm, a un 90% de conversión.

$$C_6H_5ONa + HCl + H_2O \rightarrow C_6H_5OH + NaCl + H_2O$$

Comentarios: Reacción que produce el fenol se lleva a cabo a 25°C y 1 atm, y con un 100% de conversión.

La siguiente información es relevante:

a) Sólo se permite benceno y cloro en la alimentación de la reacción 1.
b) Sólo se permite clorobenceno, sosa y agua en la alimentación de la reacción 2.
c) Se permiten C_6H_5ONa, HCl, H_2O, NaCl, C_6H_5Cl y NaOH en la alimentación de la reacción 3.

Proponga tres alternativas de distribución de especies para un proceso basado en estas tres reacciones, y compare la dificultad de separar los componentes.

7.5 Para el ejemplo mostrado del proceso tipo Solvay para la descomposición del ácido clorhídrico, detecte dos rutas adicionales a las mostradas en este capítulo. Indique los conjuntos de reacciones con el intervalo de temperaturas a las cuales es viable llevar a cabo cada reacción.

7.6 La combinación de dos componentes elementales, A y B, para producir una nueva molécula, C, tiene interés comercial pero presenta una energía libre de Gibbs desfavorable:

$$A + B \rightarrow C \qquad \Delta G = +\ 40\ \text{kcal/gmol para toda T.}$$

Se ha pensado en generar un conjunto de reacciones factibles que lleven a cabo en forma global esta reacción que originalmente es imposible. Basados en el principio de la diferencia común propuesto por May y Rudd, se han generado las siguientes relaciones entre varias moléculas:

$$D - E = A$$
$$F - G = A$$
$$H - I = A$$

Dentro de un intervalo de temperaturas de 300 a 1000°K, encuentre si a partir de estas tres relaciones es posible generar un conjunto de reacciones termodinámicamente factibles. De ser así, indique cuál sería ese conjunto de reacciones y el intervalo de temperaturas para el cual cada reacción es viable; en caso negativo, justifique su resultado.

Las relaciones para estimar la energía libre de Gibbs de cada componente pueden aproximarse mediante una ecuación lineal en T:

$$\Delta G_i = a_i + b_i T$$

con los siguientes valores de las constantes a y b para cada componente:

Componente i	a_i	b_i
D	5.29	0.0457
E	1.00	0.0100
F	−18.58	0.0286
G	0	0
H	15.50	0.0350
I	4.08	0.0064

Para el uso de estas expresiones, T debe estar en °K para obtener la energía libre de Gibbs en kcal/gmol.

7.7 Considere la siguiente reacción:

$$2NO_2 \longrightarrow 2NO + O_2$$

la cual se desea estudiar en un intervalo de temperaturas de 298 a 1298°K. Se tienen las siguientes relaciones para la estimación de la energía libre de Gibbs en función de la temperatura:

NO_2: $\Delta G = 12.42 - 0.0145\,(T - 298)$
NO: $\Delta G = 20.72 + 0.00295\,(T - 298)$
O_2: $\Delta G = 0$

a) Corrobore que esta reacción es imposible en el intervalo de temperaturas de interés. Justifique su análisis.
b) Se desea explorar el diseñar un conjunto de reacciones tipo Solvay para diseñar un proceso cuya reacción global sea la reacción de interés. Se plantean inicialmente los siguientes compuestos para esa búsqueda:

SO_2: $\Delta G = -71.74 + 0.00255\,(T - 298)$
SO_3: $\Delta G = -88.52 - 0.0199\,(T - 298)$
CO: $\Delta G = -32.81 + 0.0214\,(T - 298)$
CO_2: $\Delta G = -94.26 + 0.0007\,(T - 298)$

Genere las mitades de reacciones que sean candidatas para el proceso y prepare un diagrama de energía libre de Gibbs en función de la temperatura para esta búsqueda.

c) ¿Puede identificar algún conjunto de reacciones que lleven a cabo la transformación deseada? De ser así, establezca ese grupo y sus condiciones favorables de operación.

7.8 La descomposición de un ácido en particular

$$2HA \rightarrow H_2 + A_2$$

no puede llevarse a cabo, pues para el HA se tiene un valor de $\Delta G = -15{,}000$ cal/gmol para cualquier temperatura de interés.

Se desea explorar el desarrollo de un nuevo proceso para la descomposición de este ácido basado en un proceso tipo Solvay, o sea en un conjunto de reacciones termodinámicamente factibles y estequiométricamente consistentes. Basados en el A_2 como diferencia común, se consideran los siguientes compuestos como candidatos a aparecer en el nuevo proceso, para los cuales se puede encontrar su cambio en energía libre de Gibbs de acuerdo a los parámetros que se dan en la tabla.

Compuesto	a	b
CA_4	3	0.02
CA_2	1	0.01
DA_2	20	0.01
D	2	0.02
EA_3	4	0.0143
EA_2	0.79	0
FA_4	11.07	0
FA_3	0.5	0.0014

donde $\Delta G = a + bT - 30$, kcal/gmol, con T en °K.

Usando un rango de búsqueda para la temperatura de 300 a 1000°K, prepare un diagrama auxiliar apropiado para detectar un conjunto de reacciones que lleven a cabo la descomposición del HA. Indique para cada reacción individual a qué temperatura debería llevarse a cabo.

7.9 Se tiene interés en explorar la implementación de un proceso que lleve a cabo la siguiente reacción gobal para la producción de sulfato de sodio:

$$2NaCl + CaSO_4 \rightarrow Na_2SO_4 + CaCl_2$$

Por la forma de esta reacción con respecto a la del proceso Solvay original, se sospecha que dicha reacción es imposible.

a) Corrobore si la reacción de interés es factible.
b) En caso de que la reacción no sea factible, proponga un conjunto de medias reacciones que puedan ser candidatas a generar un proceso factible.
c) Indique si alguna combinación de las mitades de reacciones propuestas ofrecen la factibilidad termodinámica deseada.

8

SÍNTESIS DE SISTEMAS DE SEPARACIÓN

8.1 Selección de procesos de separación
8.2 Diseño de columnas de destilación
8.3 Análisis económico de columnas de destilación
8.4 Técnicas de síntesis de sistemas de separación
8.5 Uso de reglas heurísticas
8.6 Uso de programación dinámica
8.7 Un método combinado heurístico-evolutivo
8.8 Un método rápido
8.9 Análisis de sistemas de destilación complejos

Los procesos de separación son de gran importancia en la industria química. Debido a que la conversión obtenida en reactores industriales es generalmente menor al 100 por ciento y a la posibilidad de tener varios reactivos y productos, una corriente de salida de un reactor químico es generalmente seguida por un sistema de separación. El problema básico de síntesis de sistemas de separación implica especificar la corriente que contiene los compuestos que se desean separar y los productos que se desean obtener con sus grados de pureza.

Los procesos de separación pueden clasificarse en dos tipos:

a) separaciones directas, y
b) separaciones indirectas.

El primer tipo no incluye la adición de materiales externos a los que contiene la mezcla inicial, mientras que los segundos basan su operación en la alteración de las propiedades físicas de la mezcla mediante la adición de un nuevo componente. El ejemplo típico del primer tipo de separaciones es el de destilación, mientras que dentro del segundo tipo se encuentran la extracción y la absorción, entre otros.

8.1 Selección de procesos de separación

El problema inicial que se tiene ante la necesidad de separar una mezcla es elegir el proceso de separación adecuado. Una vez hecha esta selección, puede pensarse en el diseño y la optimización de ese proceso de separación. A continuación se establecen algunas guías generales para la selección inicial de sistemas de separación.

Búsqueda de propiedades físicas

El primer paso en la búsqueda de un proceso de separación adecuado es detectar las propiedades físicas de la mezcla; en base a esta información se puede elegir el sistema de separación que ofrezca mayor potencial, o al menos se puede reducir el número de alternativas de las posibles operaciones unitarias. Un tamizado inicial puede rechazar alternativas que requieran condiciones de operación extremas (muy altas o muy bajas) para llevar a cabo la separación. Por ejemplo, si una mezcla de cloruro de sodio y de cloruro de potasio quisiera separarse mediante destilación, la operación requiriría temperaturas extremadamente altas y presiones extremadamente bajas debido a las bajas volatilidades de los componentes. En este caso, por lo tanto, convendría explorar otra alternativa de separación.

Valor del producto

El valor de un producto puede oscilar entre pocos centavos por libra hasta varios dólares por libra. El valor del producto afecta la selección del sistema de separación, pues habrá opciones que pueden ser recomendables para productos caros que no tendrían una economía favorable para productos baratos. Si el precio de venta del producto es bajo, el proceso de separación debe tender a gastar poca energía, o a usar algún solvente barato. El otro factor inherente es el

nivel de demanda del producto, que define la capacidad de la planta. Por ejemplo, para una planta de altos niveles de producción, opciones como destilación o extracción ofrecen en general buenas perspectivas, mientras que alternativas como separación mediante cromatografía no tendrían un potencial de uso.

Daño al producto

En algunas aplicaciones es importante cuidar que la adición de calor o de algún componente externo no dañe el producto. Industrias como la de alimentos requieren de especial cuidado en la selección de procesos de separación. Cuando algún producto manifiesta evidencias de descomposición térmica (formación de color indeseable, desnaturalización o polimerización, por ejemplo) y se elige la destilación como medio de separación, ésta debe llevarse a cabo a vacío para mantener la temperatura de la base de la columna tan baja como sea posible.

8.2 Diseño de columnas de destilación

Siendo la destilación el método de separación más usado en la industria química, es conveniente revisar brevemente los enfoques de diseño de columnas de destilación. Existen dos niveles generales para el diseño de columnas: el uso de métodos cortos o rápidos, y el uso de métodos rigurosos. Los métodos cortos constituyen enfoques que proporcionan de una manera rápida las características físicas de primera importancia, como son el número de platos y el diámetro de la columna. Los métodos rigurosos se basan en escribir modelos completos para cada plato para luego resolverlos mediante alguna estrategia numérica. Cuando el problema de diseñar una columna de destilación es parte de un problema más grande que implica detectar la mejor secuencia de separación para una mezcla de multicomponentes, el uso de métodos rigurosos implica un esfuerzo que no es recomendable llevar a cabo, ya que se requerirá diseñar muchas columnas que no serán parte de la estructura final; en estos casos el uso de métodos cortos representa una alternativa más eficiente para comparar diferentes secuencias en la misma base y detectar la que ofrece mejor potencial. La secuencia óptima que se detecte mediante la aplicación de métodos cortos será posteriormente sujeta a diseños rigurosos para corroborar sus características preliminares.

Dentro de los métodos cortos, uno de los más usados consiste en el uso secuencial de tres relaciones que desembocan en el cálculo del número de etapas ideales que se requieren para llevar a cabo una separación especificada. Las relaciones básicas de este método, que engloba las ecuaciones de Fenske, Underwood y Gilliland, se muestran en la Tabla 8.1.

La ecuación de Fenske se usa para determinar el número mínimo de etapas ideales con datos del balance de materia y de la volatilidad relativa promedio entre los componentes clave.

La ecuación de Underwood está compuesta por dos partes. La primera se basa en condiciones de alimentación y se usa para encontrar el valor de una constante (θ) mediante algún método numérico. Debe recalcarse que la ecuación de Underwood tiene varias raíces, y la raiz de interés es la que se encuentra entre las volatilidades relativas de los componentes clave. Una vez obtenido el valor de θ, se sustituye en la segunda ecuación (la cual se evalúa para las condiciones del destilado) para obtener el valor de la razón de reflujo mínima.

Tabla 8.1 Ecuaciones de diseño para columnas de destilación

Número mínimo de etapas, Sm (Ecuación de Fenske)

$$\frac{\text{kgmol de i en el destilado}}{\text{kgmol de i en el fondo}} = (\overline{\alpha_{i-r}})^{Sm} \frac{\text{kgmol de r en el destilado}}{\text{kgmol de r en el fondo}}$$

donde $(\overline{\alpha_{i-r}})$ es la media geométrica de la volatilidad relativa entre el fondo y el destilado: $\overline{\alpha_{i-r}} = (\alpha_{i-r,Tdest} * \alpha_{i-r,Tfondos})^{\frac{1}{2}}$ siendo i el componente ligero clave y r el componente pesado clave.

Relación mínima de reflujo, Rm (Ecuación de Underwood)

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{\alpha_i X_{i,F}}{\alpha_i - \theta} = 1 - \phi$$

donde $X_{i,F}$ es la composición de la alimentación en fracción mol,
α_i es la volatilidad relativa evaluada a las condiciones de la alimentación
ϕ es la fracción de líquido en la alimentación
θ es la constante de Underwood, que se obtiene al resolver esta ecuación.

$$R_m = \sum_{i=1}^{N} \frac{\alpha_i X_{i,D}}{\alpha_i - \theta} - 1$$

donde $X_{i,D}$ es la fracción mol del destilado,
α_i es la volatilidad relativa evaluada a las condiciones del destilado.

Número de etapas ideales, S (Ecuación de Gilliland)

Para $\frac{R - R_m}{R+1} < 0.125$, usar

$$\frac{S - S_m}{S+1} = 0.5039 - 0.5968\left(\frac{R - R_m}{R+1}\right) - 0.0908 \log\left(\frac{R - R_m}{R+1}\right)$$

y para $\frac{R - R_m}{R+1} > 0.125$, usar

$$\frac{S - S_m}{S+1} = 0.6257 - 0.9868\left(\frac{R - R_m}{R+1}\right) + 0.5160\left(\frac{R - R_m}{R+1}\right)^2 - 0.1738\left(\frac{R - R_m}{R+1}\right)^3$$

A partir del conocimiento del número mínimo de etapas ideales y de la razón de reflujo mínima, y especificando un valor de la razón de reflujo (R) de operación, la ecuación de Gilliland proporciona el número de etapas ideales.

Para determinar el diámetro de la columna, Heaven propuso en su tesis de maestría la correlación empírica mostrada en la Tabla 8.2. En esa tabla se incluye también la correlación del mismo autor para determinar la altura de la columna.

Tabla 8.2
Ecuaciones de Heaven para diámetro y altura de columnas de destilación

Diámetro de la columna, Dc:

$$D_c = \left[\left(\frac{4}{\pi V}\right)(D)(R+1)(22.2)\left(\frac{T_{DV}}{273}\right)\left(\frac{1}{P}\right)\left(\frac{1}{3600}\right)\right]^{1/2}$$

donde:

$$V = 0.761\left(\frac{1}{P}\right)^{1/2}$$

D_C es el diámetro de la columna, m
D es el flujo de destilado, kg mol/h
R es la razón de reflujo
T_{DV} es la temperatura de rocío del vapor en el condensador, °K
P es la presión de la columna, atm

Altura de la columna, Hc:

$$H_c = 0.61\left(\frac{S}{\eta}\right) + 4.27$$

donde η es la eficiencia promedio de los platos de la columna y S es el número de etapas ideales. La altura de la columna se obtiene en metros.

8.3 Análisis económico de columnas de destilación

Después de definir las condiciones de las mezclas de entrada y la especificación de los productos deseados como parte de un problema típico de diseño de una columna de destilación, un análisis de grados de libertad indica que deben definirse dos variables adicionales para especificar el sistema. Lo más común es fijar la presión de diseño de la columna y la razón de reflujo. Como una consencuencia natural de tener dos grados de libertad, los mejores valores de diseño de estas variables pueden encontrarse mediante el uso de algún algoritmo de optimización multivariable. Alternativamente, ambas variables podrían especificarse de acuerdo a la experiencia del diseñador.

Para mostrar el efecto que las variaciones en la razón de reflujo tienen en la economía de una columna de destilación, consideremos el caso de que la presión se fije mediante algún criterio práctico. El objetivo de optimizar la razón de reflujo se puede entender si observamos el efecto de esta variable en el costo de operación de la columna, consistente de costos fijos (costo de equipo) más costos variables (costos de servicios):

a) Partiendo del límite dado por la razón de reflujo mínima para lograr una separación estipulada, un aumento de la razón de reflujo tiende a

disminuir el costo fijo debido al menor número de platos que se requieren para llevar a cabo la separación. A valores suficientemente altos de la razón de reflujo, el número de platos tiende a su valor mínimo y el costo fijo está dominado por el aumento del diámetro del equipo, lo que ocasiona un cambio en la tendencia final del costo fijo.

b) Un aumento de la razón de reflujo se traduce en un incremento en el costo anual de servicios debido a la necesidad de evaporar y condensar mayores flujos en la columna.

La suma de los dos rubros proporciona un costo total que exhibe un mínimo a un valor específico de la razón de reflujo. Este aspecto se ilustra en el siguiente ejemplo.

Ejemplo 8.1 Optimización de una columna de destilación

Se desea diseñar una columna de destilación de platos perforados (tipo "sieve") para procesar una mezcla de benceno-tolueno con una alimentación de 700 lbmol/h, operando a 1 atm. La alimentación tiene 45% mol de benceno y entra como líquido saturado. El producto de destilado debe tener una composición de 92% mol de benceno, y el de fondos 95% mol de tolueno. Determinar la razón de reflujo óptima para esta separación.

Datos adicionales

Para mezclas benceno-tolueno:

Calores latentes pueden tomarse como 13,700 Btu/lbmol

Capacidades caloríficas pueden tomarse como 40 Btu/lbmol °F

Para coeficientes globales de transferencia de calor

Para el hervidor: 80 Btu/hr ft^2 °F

Para el condensador: 100 Btu/hr ft^2 °F

Para el agua de enfriamiento:

Temperatura promedio = 90°F

Incremento máximo permisible = 50°F.

Para el vapor:

Se usa vapor saturado a 60 psia. A estas condiciones, la temperatura de saturación es 292.7°F, y el calor latente es 915.5 Btu/lb.

Para la columna:

El diámetro de la columna debe basarse en una velocidad máxima de vapor en el domo de 2.5 ft/s.

La eficiencia de los platos puede tomarse como 70 por ciento.

La columna operará 8,500 hr/año.

Datos de costos

Vapor = $0.75/1000 lb

Agua de enfriamiento = $0.045/1000 gal o $0.054/10,000 lb

Los costos de tubería, instrumentación y aislantes pueden tomarse como el 60 por ciento del costo del equipo instalado. Los costos fijos anuales equivalen al 15 por ciento del costo total del equipo instalado, tuberías, instrumentación y aislantes.

Los siguientes costos son para equipo instalado, y pueden ser usados con interpolación:

Columna de destilación con platos tipo sieve

Diámetro, in.	$/plato
60	1,200
70	1,500
80	1,850
90	2,250
100	2,700

Condensador-intercambiador de tubo y coraza

Área, ft^2	$
800	9,750
1000	11,250
1200	12,600
1400	13,800
1600	14,850

Hervidor-intercambiador de tubo y coraza

Area, ft^2	$
1000	17,250
1400	21,150
1800	24,600
2200	27,750
2600	30,300

Solución

Al haber fijado la presión de diseño, los costos fijos y los costos variables dependen de la razón de reflujo. La búsqueda del óptimo está restringida por la razón de reflujo mínima para efectuar esta separación, la cual debe calcularse primero. Con ayuda de un diagrama de equilibrio y siguiendo los principios del método de McCabe-Thiele, se encuentra que la razón de reflujo mínima es de 1.14. La búsqueda del óptimo puede hacerse por alguno de los métodos como Sección Dorada o Fibonacci. En este caso, para mostrar la dependencia de los costos fijos y variables con la razón de reflujo, evaluaremos los costos resultantes para varios valores supuestos de la razón de reflujo y mediante su representación gráfica encontraremos el valor óptimo.

Se muestran a continuación los cálculos para un valor supuesto de R = 1.5.

Columna de destilación
El número de platos ideales se calcula usando el método de McCabe-Thiele como 12.1. El número de platos reales se calcula incorporando la eficiencia de los platos:

$$n = (12.1 - 1)/0.7 = 16$$

Para encontrar el diámetro de la columna se requiere evaluar la velocidad del vapor en la parte superior de la torre. De balances de materia, los flujos de destilado, D, y de fondos, B, resultan ser

D = 322 moles/h
B = 378 moles/h

El flujo total en el domo de la columna es

$$L + D = D\,(R + 1) = 322(1 + 1.5) = 805 \text{ moles/h}$$

Suponiendo gases ideales,

$$v_{domo} = 2.5 \text{ ft/s} = (805)(359)(460 + 179)(4)/(3600)(492)(D_c)^2$$

de donde

$$D_c = 7.3 \text{ ft}$$

Costo por plato = \$2145
Costo debido a la columna = (2145)(16)(1 + 0.6)(0.15)
= 8235 \$/año

Condensador
La carga térmica es

$$Q_C = (805)(13{,}700) = 11{,}000{,}000 \text{ Btu/h}$$

Con un valor de U = 100 Btu/h ft^2 °F, y con una temperatura del domo de la columna de 179°F (de diagrama de equilibrio), se obtiene

$$A = 1240 \text{ ft}^2$$

por lo tanto,

Costo = \$12,825
Costo debido al condensador = 12,825 (1 + 0.6)(0.15) = 3075 \$/año

Hervidor

La carga térmica del hervidor, Q_B, se estima de un balance de energía global sobre la columna. Tomando una temperatura de referencia de 179°F,

$$Q_B = 378(40)(227 - 179) + 11{,}000{,}000 - 700(40)(201 - 179)$$
$$Q_B = 11{,}110{,}000 \text{ Btu/h}$$

Con un coeficiente de transferencia de calor de 80 Btu/h ft^2 °F y una temperatura de fondos de 227°F, se obtiene

$$A = 2120 \text{ ft}^2$$

por lo cual

Costo = \$27,150
Costo debido al hervidor = 27,150(1 + 0.6)(0.15) = 6510 \$/año

Agua de enfriamiento

Costo anual = (11,000,000)(0.054)(8500)/(1.0)(50)(10,000)
= 10,110 \$/año

Vapor de calentamiento

Costo anual = (11,110,000)(0.75)(8500)/(915.5)(1000)
= 77,550 \$/año

Costo total anual

El costo total de la columna a la razón de reflujo estipulada está dado por la suma de los costos fijos anualizados más los costos de servicios:

Costo total = 8235 + 3075 + 6510 + 10,110 + 77,550 = 105,480 \$/año

Los costos totales anuales se obtienen similarmente para otros valores de la razón de reflujo, y la siguiente tabla resume los resultados obtenidos:

			Costos anuales					
R	n	Dc, ft	Columna	Condensador	Hervidor	Agua	Vapor	Costo total
1.14	∞	6.7	∞	2,805	5,940	8,670	66,450	∞
1.2	29	6.8	13,395	2,865	6,060	8,910	68,250	99,480
1.3	21	7.0	9,930	2,925	6,195	9,300	71,250	99,600
1.4	18	7.1	8,880	3,000	6,360	9,705	74,400	102,345
1.5	16	7.3	8,235	3,075	6,510	10,110	77,550	105,480
1.7	14	7.7	7,935	3,225	6,810	10,935	83,550	112,455
2.0	13	8.0	7,815	3,240	7,200	12,150	92,700	123,285

Los resultados se representan en la Figura 8.1, de donde puede inferirse que la razón de reflujo óptima es aproximadamente 1.25, lo cual equivale a



R óptima = 1.1 R mínima

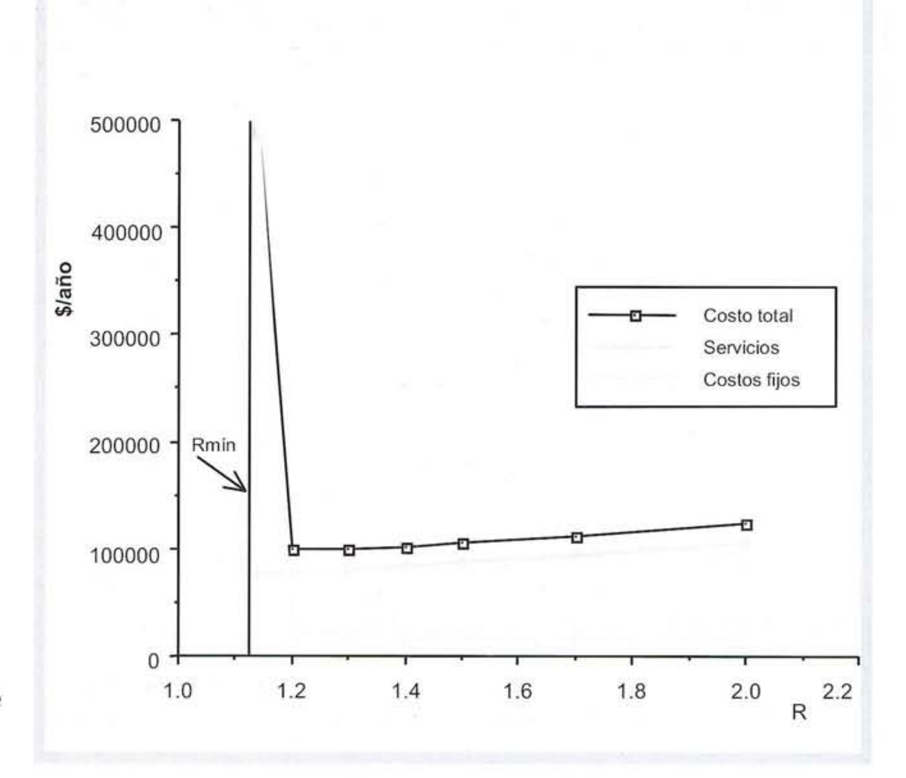


FIGURA 8.1
Dependencia de los costos anuales de la columna de destilación.

8.4 TÉCNICAS DE SÍNTESIS DE SISTEMAS DE SEPARACIÓN

La síntesis de sistemas de separación puede hacerse siguiendo dos enfoques generales:

a) métodos heurísticos, y
b) métodos algorítmicos.

Los métodos heurísticos se basan en la experiencia y, a cambio de no garantizar una solución óptima, proveen una técnica rápida para la obtención de una secuencia de separación, la cual se espera sea una buena alternativa desde un punto de vista económico. Los métodos algorítmicos se basan en el uso de técnicas formales de optimización y requieren por lo tanto del uso de computadora; el uso de estos métodos garantiza en principio la obtención de una secuencia de separación óptima de acuerdo a alguna función objetivo en particular (por ejemplo, minimizar el costo de operación del sistema). Ambos enfoques pudieran combinarse para un problema en particular para buscar un compromiso entre el espacio de búsqueda y un resultado óptimo o cercano al óptimo.

Tabla 8.3			
Número de posibles secuencias de separación en función del número de componentes			
Número de componentes [N]	Número de subgrupos [N(N + 1)/2] – N	Número de subproblemas de separación [(N – 1)(N)(N + 1)/6]	Número de posibles secuencias [2(N – 1)]!/N!(N – 1)!
2	1	1	1
3	3	4	2
4	6	10	5
5	10	20	14
6	15	35	42
7	21	56	132
8	28	84	429
9	36	120	1,430
10	45	165	4,862

El problema de la síntesis de sistemas de separación se complica por la naturaleza combinatorial del problema. La Tabla 8.3 muestra cómo el número de subproblemas de separación y el número de posibles secuencias que se pueden generar cambian con el número de componentes de la mezcla original.

Para ilustrar una de las entradas de esta tabla, consideremos una mezcla de tres componentes, ABC, ordenados en sentido decreciente a su volatilidad relativa (A es el más volátil, C el más pesado), y que deben de separarse en sus componentes puros. A partir de esta mezcla se pueden generar tres subgrupos que dan origen a problemas de separación: ABC, AB, BC. Notar que el subgrupo AC no puede aparecer por la presencia del componente intermedio B. La Figura 8.2 muestra las dos secuencias diferentes que se pueden generar para este caso, lo cual incluye cuatro subproblemas de separación consistente en cuatro diferentes columnas de destilación.

Como puede observarse de la Tabla 8.3, el problema crece de manera notable a medida que el número de componentes aumenta. Más aún, el problema se complica significativamente al considerar más de una posible operación unitaria para la separación de los componentes. Es necesario entonces tener un procedimiento eficiente que detecte la secuencia de separación óptima (o cercana a la óptima), y de ser posible, con un mínimo de esfuerzo computacional.

8.5 Uso de reglas heurísticas

Las reglas heurísticas se basan en la experiencia que se ha adquirido sobre la operación y diseño de procesos existentes. Rudd, Powers y Siirola reportan las siguientes reglas heurísticas para procesos de separación:

1. Elegir el método de separación primero.
2. Cuando sea posible, reducir la carga de separación mediante la división y mezclado de corrientes.

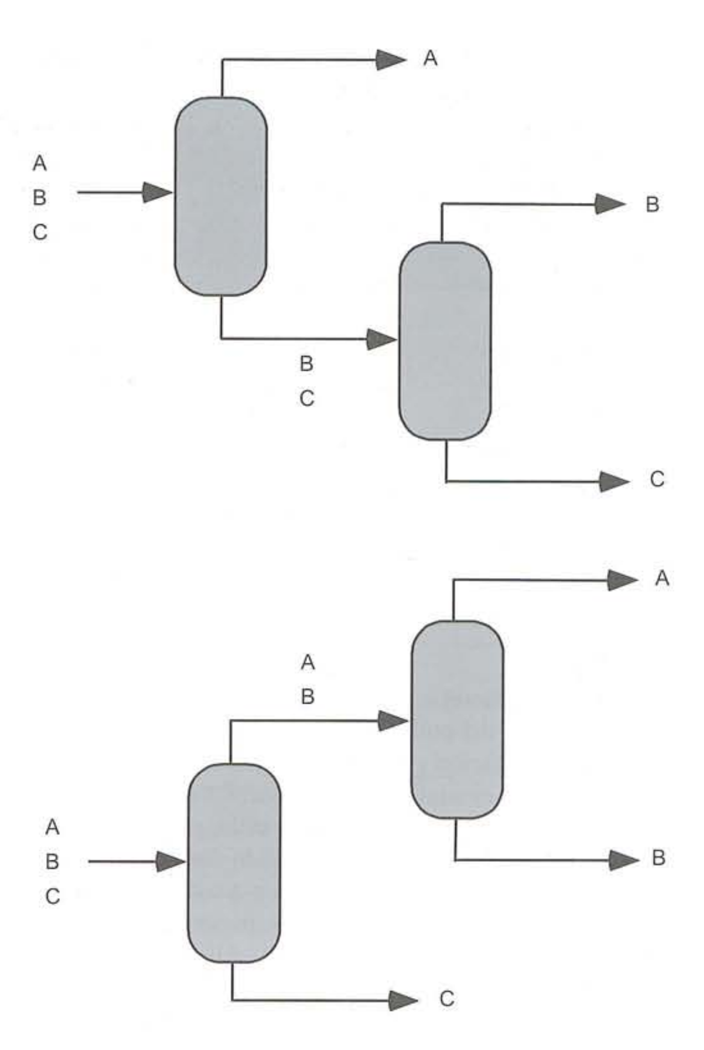


FIGURA 8.2
Para una mezcla de tres componentes se tienen tres diferentes subgrupos, cuatro subproblemas de separación y dos secuencias.

3. Tratar de separar los componentes más abundantes primero. Si las cantidades son iguales, separar en partes iguales.
4. Separar los componentes corrosivos y peligrosos primero.
5. Hacer la separación más difícil al último.
6. Evitar separaciones que requieren el uso de especies externas al proceso. Sin embargo, si se usa una especie externa, separarla tan pronto como sea posible.
7. Evitar el uso de temperaturas y presiones extremas, pero si esto no es posible, preferir las altas.
8. En destilación, obtener el producto deseado como destilado.
9. En destilación, favorecer las secuencias que separan los componentes uno por uno en el destilado.

A continuación se describe la lógica de cada una de estas reglas.

1. Elegir el método de separación primero.

   La elección de la operación unitaria que conviene utlizar debe ser el primer punto a esclarecer cuando se desea separar una mezcla. Las guías generales que se presentaron en la sección 8.1 proveen una ayuda en esta búsqueda.

2. Cuando sea posible, reducir la carga de separación mediante la división y mezclado de corrientes.

   El objetivo básico de esta regla es el de disminuir los costos de energía del proceso de separación. Mientras menor sea el flujo que se procesa en una columna de destilación, menor será la cantidad de energía que se gasta en evaporar y condensar las mezclas en fondos y destilados.
3. Tratar de separar los componentes más abundantes primero. Si las cantidades son iguales, separar en partes iguales.

   Si el componente más abundante se separa al último por ejemplo, todas las columnas de la secuencia de separación deberán diseñarse con un diámetro mayor y tendrán un mayor gasto de energía, ya que se deberá evaporar y condensar una mayor cantidad de mezcla en cada una de ellas. El costo de operación de la secuencia, por lo tanto, se espera que disminuya si se separa primero ese componente más abundante.
4. Separar los componentes corrosivos y peligrosos primero.

   Los componentes corrosivos y peligrosos requieren de material de construcción más caro, por ejemplo acero inoxidable. Es deseable por lo tanto disminuir el costo del equipo al separar primero ese tipo de componentes.
5. Hacer la separación más difícil al último.

   Esta regla está asociada con las características de operación de la secuencia de separación. Si una separación es muy difícil, es mejor realizarla en ausencia de otros componentes para facilitar la operación y el control de esa columna.
6. Evitar separaciones que requieren el uso de especies externas al proceso. Sin embargo, si se usa una especie externa, separarla tan pronto como sea posible.

   Lo que establece esta regla es que es preferible usar las separaciones directas sobre las indirectas. Cada operación indirecta, al introducir un componente externo a la mezcla tal como un solvente, requiere posteriormente de un proceso de separación directa para recuperar el solvente. Además, si el solvente no se separa inmediatamente, se tendría como consecuencia el procesamiento de ese componente en las otras columnas de la secuencia con un aumento en el diámetro de los equipos y en sus costos de energía. Estos argumentos conducen a pensar en destilación como la opción natural para separar una mezcla. ¿Cuándo no es factible o conveniente usar destilación? Podrían enumerarse tres casos:

   a) Cuando hay daño térmico al producto.
   b) Cuando la volatilidad relativa entre componentes clave es cercana a la unidad.
   c) Cuando se requieren condiciones extremas de presión y/o temperatura.

7. Evitar el uso de temperaturas y presiones extremas, pero si ésto no es posible, preferir las altas.

   Es deseable evitar incursionar por condiciones de operación que impliquen el uso de temperaturas bajas, ya que esto puede reque-

rir del uso de refrigerantes como medio externo de enfriamiento. El costo de operación del proceso de separación tiende en esos casos a aumentar de manera drástica debido al alto costo que implica el uso de refrigerantes.

8. En destilación, obtener el producto deseado como destilado.

   En general, las impurezas que contiene una mezcla tienen una baja volatilidad, por lo que a menudo son referidas en la práctica como *pesados*. En una destilación, por lo tanto, las impurezas tenderán a salir por los fondos de la columna. En otras palabras, los destilados son más puros que los fondos. Si el producto deseado puede obtenerse alternativamente por secuencias que lo producen como destilado o como fondo, es conveniente preferir la secuencia que lo produce como destilado.

9. En destilación favorecer las secuencias que separan los componentes uno por uno en el destilado.

   Las secuencias que separan los componentes uno por uno en el destilado se conocen como secuencias directas. Por otro lado, las secuencias que separan los componentes uno por uno por los fondos se conocen como secuencias indirectas. Las secuencias directas han sido muy usadas industrialmente, y la amplia experiencia adquirida sobre estos esquemas hacen que ofrezcan una alternativa confiable para su implementación en nuevos diseños.

Es de hacerse notar que estas reglas pueden contradecirse en un problema en particular. Por ejemplo, el separar el componente más abundante primero podría generar una secuencia que efectuara la separación más difícil primero, lo cual contrapone otra de las reglas heurísticas. La decisión sobre cuál regla heurística debe tener más peso puede ser otra heurística en sí, ya que puede depender de la naturaleza del proceso y de un objetivo en particular del diseñador.

8.6 Uso de programación dinámica

Hendry y Hughes propusieron el uso de programación dinámica para la síntesis de sistemas de separación. El uso de programación dinámica representa un enfoque algorítmico de solución y, por lo tanto, puede garantizar una solución óptima bajo las restricciones del diseño individual de cada columna. En otras palabras, la técnica de programación dinámica proporciona la secuencia en que los separadores deben colocarse para formar una estructura óptima. La aplicación del principio de optimalidad de Bellman para sistemas de separación implica el definir primero todos los subgrupos de separación o posibles *alimentaciones* que pueden generarse a partir de la mezcla original. Por ejemplo, si se desea separar mediante destilación una mezcla de cinco componentes ABCDE, ordenados en sentido decreciente de acuerdo a su volatilidad relativa (A es el más volátil y E es el más pesado), los posibles subgrupos que se pueden generar son:

ABCDE				5 componentes
ABCD	BCDE			4 componentes
ABC	BCD	CDE		3 componentes
AB	BC	CD	DE	2 componentes

Notar que al tener ordenados los componentes de acuerdo a la propiedad respectiva, en este caso sus volatilidades, subgrupos que no tengan un orden secuencial no es posible generarlos. Por ejemplo, el subgrupo AC no puede generarse, ya que la presencia de B con volatilidad intermedia entre A y C ocasiona que mediante destilación no sea posible separarlo como producto principal aislado; B se producirá acompañado de A en algún destilado, o acompañado de C en algún fondo.

De acuerdo al principio de optimalidad de Bellman, el sistema se optimiza si analizamos primero las separaciones de 2 componentes, lo cual considera todas las posibles alimentaciones provenientes de la etapa anterior (en este caso, la penúltima columna) de cualquier secuencia de separación, ya que todas deben terminar por separar alguna mezcla binaria; en seguida se optimiza el subsistema consistente de 3 componentes, lo cual implica el considerar el rompimiento de esa mezcla (un componente por el destilado y dos por el residuo o viceversa) y agregar el costo de separar la mezcla binaria resultante. Para 4 componentes se tendrían tres posibles maneras de romper ese subgrupo, y todas las separaciones de los nuevos subgrupos de 3 o 2 componentes que se generan ya se han analizado. El proceso se repite hasta llegar al sistema original de 5 componentes. Con este procedimiento se forma una tabla de programación dinámica, de la cual se obtiene la secuencia de separación óptima. Debe ser clara la conveniencia de diseñar todas las columnas mediante métodos cortos, para luego proceder a su evaluación económica y, en su caso, optimizar alguna variable de búsqueda (en este caso, la presión de la columna y/o la razón de reflujo).

Tiscareño y Jiménez usaron programación dinámica para obtener la secuencia de destilación que separa una mezcla de 5 hidrocarburos ligeros en sus componentes puros a un costo mínimo. Se consideró la presión constante en cada secuencia, y se varió su valor entre 4 y 15 atmósferas para analizar este efecto en la estructura de separación óptima. Cada columna se diseñó con los métodos de Fenske-Underwood-Gilliland para el número de etapas ideales, y de Heaven para el diámetro y altura de la columna. Los datos del problema y las expresiones para la evaluación económica, basadas en el trabajo de Guthrie, se reportan en la Tabla 8.4.

La Tabla 8.5 muestra el resultado de aplicar el método de programación dinámica para este problema para el caso particular de presiones de diseño de 6.8 atmósferas para todas las columnas. Notar en la tabla que para cada subgrupo que se puede generar de la mezcla original, se consideran todos los posibles rompimientos, lo cual genera 20 diferentes problemas de diseños de columnas. La tercera columna de la Tabla 8.5 reporta el costo anual que se obtuvo para cada columna de destilación individual después de optimizar la razón de reflujo. Una vez que se tienen estos costos individuales, la optimización de la secuencia mediante programación dinámica es directa, ya que lo único que debe hacerse es completar los costos de separación acumulados para cada subgrupo y detectar el mínimo local. Por ejemplo para el subgrupo ABC, hacer el rompimiento A/BC cuesta 103,640 \$/año; a este costo debe agregarse el de la separación que se requiere para completar la ruta a sus productos puros, en este caso B/C (121,600 \$/año), lo cual resulta en un costo total de 225,240 \$/año. Al analizar la otra posible opción para separar este subgrupo ABC, basada en hacer primero el rompimiento AB/C seguido de la separación A/B, se obtiene un costo mayor, lo cual indica que la primera ruta es la mejor a implementar si aparece el subgrupo ABC en la secuencia de separación. Al continuar el procedimiento y llegar al subgrupo de cinco componentes, que constituye la mezcla

Tabla 8.4

Especificación de mezcla a separar y ecuaciones para el análisis económico

Mezcla de alimentación:
Propano (A), i-butano (B), n-butano (C), i-pentano (D), n-pentano (E).

Flujo = 907.2 kg mol/h

Composición:

Componente	Fracción mol
A	0.05
B	0.15
C	0.25
D	0.20
E	0.35

Tipo de separador:
Columna de destilación

Costo base para la optimización:

$$\text{Costo total anual} = \text{Costo anual de operación} + \frac{\text{Costo total de instalación de equipo}}{\text{vida del proyecto}}$$

Costo de columnas:

$$\text{Costo de la columna instalada} = 4.34\left[7620 D_c\left(\frac{H_c}{12.2}\right)^{0.68}\right]$$

Si la presión de la columna es mayor de 3.4 atm se utiliza el factor de corrección $[1 + 0.0147(P - 3.4)]$

$$\text{Costo de platos instalados} = 70\left(\frac{S}{\eta}\right)\left(\frac{D_c}{1.22}\right)^{1.9}$$

Costo de Instrumentación = 4,000

Costo de mantenimiento = 2% del costo total de la columna

Costo de Intercambiadores de calor:

$$\text{Costo total} = 3.39\left[9000\left(\frac{A}{92.1}\right)^{0.65}\right]$$

donde A es el área del intercambiador en m^2.

Si la presión es mayor a 10.2 atm se usa el factor de corrección: $[1 + 0.0147(P - 10.2)]$

Costo de operación del intercambiador = 8,500 (Cu Q) + 2% del costo total.
donde Cu es el costo de servicios y Q la carga térmica del intercambiador

Material de construcción: Acero al carbón

Costo de servicios:

Servicio	Costo $/millón kcal
Vapor (28.23 atm)	4.29
Vapor (11.22 atm)	3.24
Vapor (4.08 atm)	2.40
Vapor (1.70 atm)	1.75
Agua de enfriamiento (32.2 °C)	0.28
Amoniaco (1 °C)	6.91
Amoniaco (-17.78 °C)	12.43
Amoniaco (-21.67 °C)	16.59

Coeficiente de transferencia de calor:

U = 200 Btu/hr ft^2 °F

Otros datos: Recuperación de componentes clave = 98%; condiciones de alimentación = líquido saturado; eficiencia promedio de platos = 80%; horas de operación por año = 8,500; vida del proyecto = 10 años.

Tabla 8.5
Uso de programación dinámica para detectar la mejor secuencia de separación a 6.8 atmósferas

Subgrupo	Separación	Costo de separación, 10^5 $/año	Costo total incluyendo separaciones subsecuentes, 10^5 $/año	Costo mínimo de cada subgrupo, 10^5 $/año
(AB)	A/B	0.6183	0.6183	0.6183
(BC)	B/C	1.2160	1.2160	1.2160
(CD)	C/D	0.6141	0.6141	0.6141
(DE)	D/E	3.6318	3.6318	3.6318
(ABC)	A/BC	1.0364	2.2524	2.2524
	AB/C	4.2727	4.8910	
(BCD)	B/CD	1.3718	1.9859	1.9859
	BC/.D	0.7767	1.9927	
(CDE)	C/DE	1.0734	4.7052	
	CD/E	3.8047	4.4188	4.4188
(ABCD)	A/BCD	1.2330	3.2189	
	AB/CD	4.8206	6.0530	
	ABC/D	0.8254	3.0778	3.0778
(BCDE)	B/CDE	1.5907	6.0095	
	BC/DE	1.2463	6.0941	
	BCD/E	3.7983	5.7842	5.7842
ABCDE	A/BCDE	1.5367	7.3209	
	AB/CDE	5.6047	10.6418	
	ABC/DE	1.3024	7.1866	
	ABCD/E	3.8010	6.8788	6.8788

original, el costo total basado en el rompimiento ABCD/E más las separaciones necesarias para el subgrupo ABCD, ya analizado en la tabla, resultan en el costo mínimo de separación, 687,880 $/año. Esto implica que después del rompimiento inicial se debe efectuar la separación ABC/D, seguida por A/BC y finalmente el rompimiento binario B/C. El análisis es similar para otras presiones de diseño.

La secuencia de separación óptima que se obtiene para cada presión analizada se muestra en la Figura 8.3. Se observa que al aumentar la presión, el costo anual del sistema disminuye hasta alcanzar un valor mínimo a 6.8 atmósferas, y después aumenta gradualmente. Una de las causas principales de este comportamiento es el tipo de servicios que se requieren, tanto en el condensador como en el hervidor. A bajas presiones, algunas columnas de la secuencia requieren del uso de algún refrigerante en el condensador debido al bajo punto de rocío de la mezcla en el destilado. A medida que la presión de diseño aumenta, la temperatura del destilado se eleva de tal manera que el uso de agua de enfriamiento en el condensador empieza a ser factible para alguna de las columnas de la secuencia, hasta que a presiones de 6.8 atmósferas todos los destilados de la secuencia pueden condensarse con el uso de agua de enfriamiento (este comportamiento refleja el efecto de la regla heurística 7 de la sección anterior). Si la presión de diseño se sigue aumentando, el efecto dominante comienza a observarse por el lado del hervidor, ya que se va requiriendo de un vapor de mayor presión, lo cual se traduce en un aumento en el costo anual a presiones mayores de 6.8 atmósferas.

La contribución de servicios representa la parte más importante en el costo anual de columnas de destilación, lo cual se refleja en que la razón de reflujo tienda en todos los casos a su valor mínimo. Este comportamiento, aunque aumenta significativamente el número de platos requeridos para la separación, disminuye las cargas térmicas necesarias en el condensador y en el hervidor, proporcionando un costo mínimo de separación. La razón de reflujo mínima aumenta con la presión debido a que la volatilidad relativa entre componentes clave disminuye.

Por otro lado, una razón de reflujo muy cercana a la mínima, aunque produce un costo mínimo de separación, implica columnas con un número excesivo de platos, lo que ocasiona diseños poco prácticos. Basados en criterios de operación, se puede establecer un límite del número máximo de platos permisible y diseñar la columna a la razón de reflujo que implique ese número de etapas. De lo anterior se puede establecer una regla heurística para fijar la razón de reflujo:

Diseñar las columnas de destilación a una razón de reflujo tan cercana a la mínima como sea posible.

Se observa también que todas las secuencias comienzan separando el componente más abundante. A presiones altas, el tren de destilación óptima consiste de una secuencia de separación indirecta (separar componentes uno por uno por los fondos), lo contrario a las separaciones directas ampliamente utilizadas en la industria (heurística 9 de la lista proporcionada al inicio de este capítulo).

Rathore et al. extendieron el análisis de este problema de separación considerando la presión de cada columna como variable de optimización, además de la razón de reflujo. La Tabla 8.6 resume los resultados de este ensayo al aplicar el método de programación dinámica.

La Figura 8.4 muestra la secuencia óptima para este caso. Son de hacerse notar las siguientes observaciones:

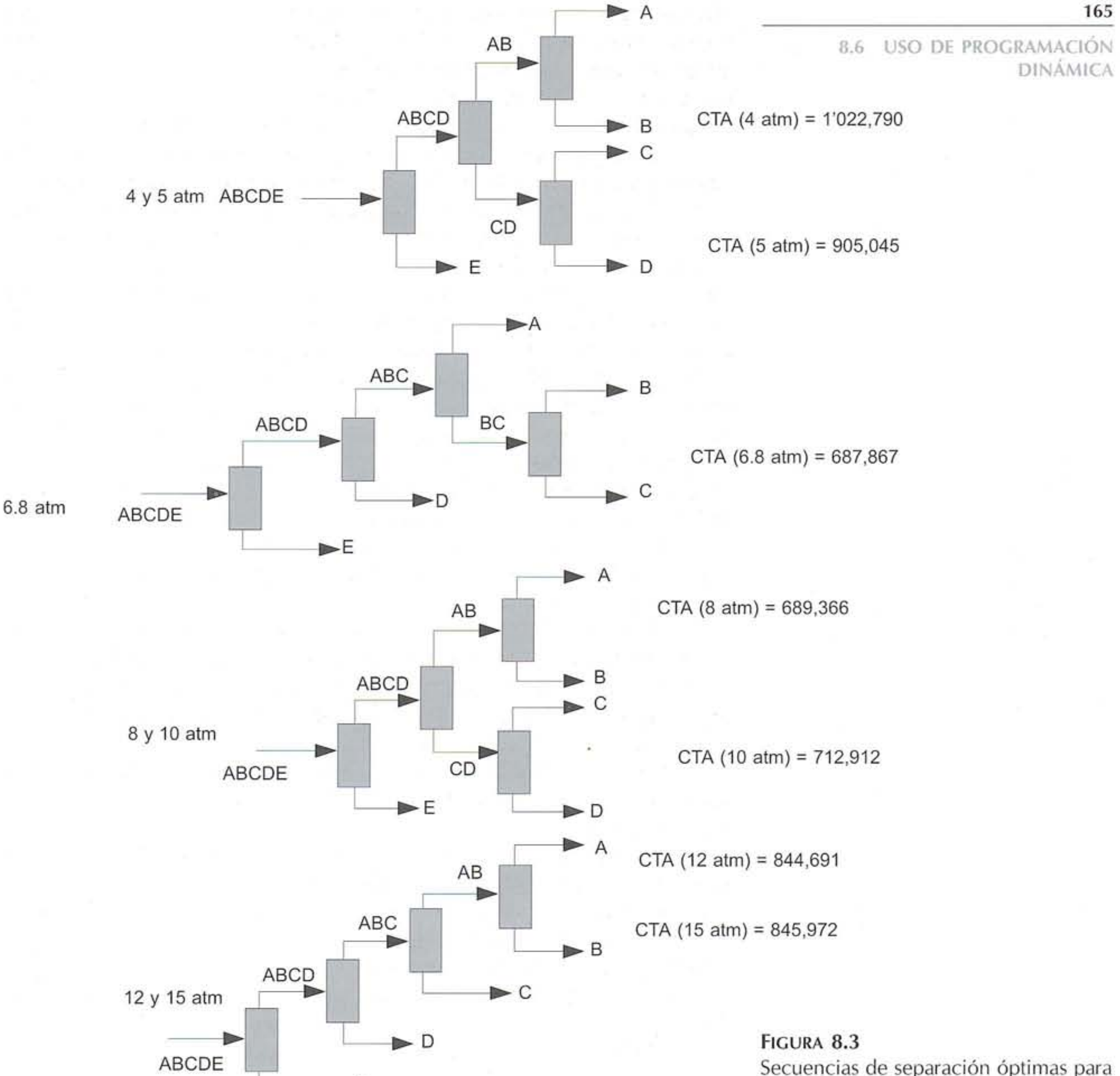


FIGURA 8.3
Secuencias de separación óptimas para cada presión de diseño.

a) Columnas con el mismo destilado tienen la misma presión óptima.
b) La secuencia de separación óptima es diferente a las obtenidas con diseños isobáricos.
c) Se obtiene una reducción significativa en el costo de separación del sistema.

Una consecuencia relevante de la primera observación es que se puede proporcionar una regla heurística para fijar la presión óptima de diseño para columnas de destilación. El principio fundamental es el de prevenir el uso de refrigerantes en el condensador. A partir de la composición del destilado puede entonces estimarse la presión que proporcione una temperatura de rocío que

Tabla 8.6

Uso de programación dinámica considerando la presión de cada columna como variable de optimización

Subgrupo	Separación	Presión óptima, atm	Costo de separación, 10^5 \$/año	Costo total incluyendo separaciones subsecuentes, 10^5 \$/año	Costo mínimo de cada subgrupo, 10^5 \$/año
(AB)	A/B	15.1	0.2613	0.2613	0.2613
(BC)	B/C	6.3	0.9493	0.9493	0.9493
(CD)	C/D	4.5	0.5927	0.5927	0.5927
(DE)	D/E	2.0	1.6920	1.6920	1.6920
(ABC)	A/BC	15.1	0.3953	1.3446	1.3446
	AB/C	8.5	1.1980	1.4593	
(BCD)	B/CD	6.3	1.1260	1.7187	
	BC/D	5.1	0.7675	1.7168	1.7168
(CDE)	C/DE	4.5	0.7817	2.4737	
	CD/E	3.3	1.8530	2.4457	2.4457
(ABCD)	A/BCD	15.1	0.4707	2.1875	2.1875
	AB/CD	8.5	1.4050	2.2590	
	ABC/D	6.3	0.9445	2.2891	
(BCDE)	B/CDE	6.3	1.3340	3.7797	
	BC/DE	5.1	0.9443	3.5856	3.5856
	BCD/E	4.1	2.4180	4.1358	
ABCDE	A/BCDE	15.1	0.5715	4.1571	4.1571
	AB/CDE	8.5	1.6500	4.3570	
	ABC/DE	6.3	1.1490	4.1856	
	ABCD/E	4.9	2.6600	4.8475	

haga posible el uso de agua de enfriamiento en el condensador. Si a presión atmosférica no se requiere refrigerante, la columna deberá diseñarse a esa presión. De otra manera, se puede aplicar la siguiente regla heurística para fijar la presión óptima de diseño:

Diseñar la columna de destilación a la presión más baja posible que garantice el uso de agua de enfriamiento en el condensador.

8.7 Un método combinado heurístico-evolutivo

Los métodos algorítimicos puros presentan el inconveniente de que el trabajo de cómputo necesario es en ocasiones demasiado alto debido al espacio de búsqueda que se analiza para encontrar una solución óptima. Seader y Westerberg desarrollaron un método combinado de reglas heurísticas y técnicas evolucionarias tratando de combinar las bondades de ambos enfoques.

Las técnicas evolutivas se basan en analizar todas las posibles alternativas que se pueden generar al considerar los puntos vecinos de una estructura

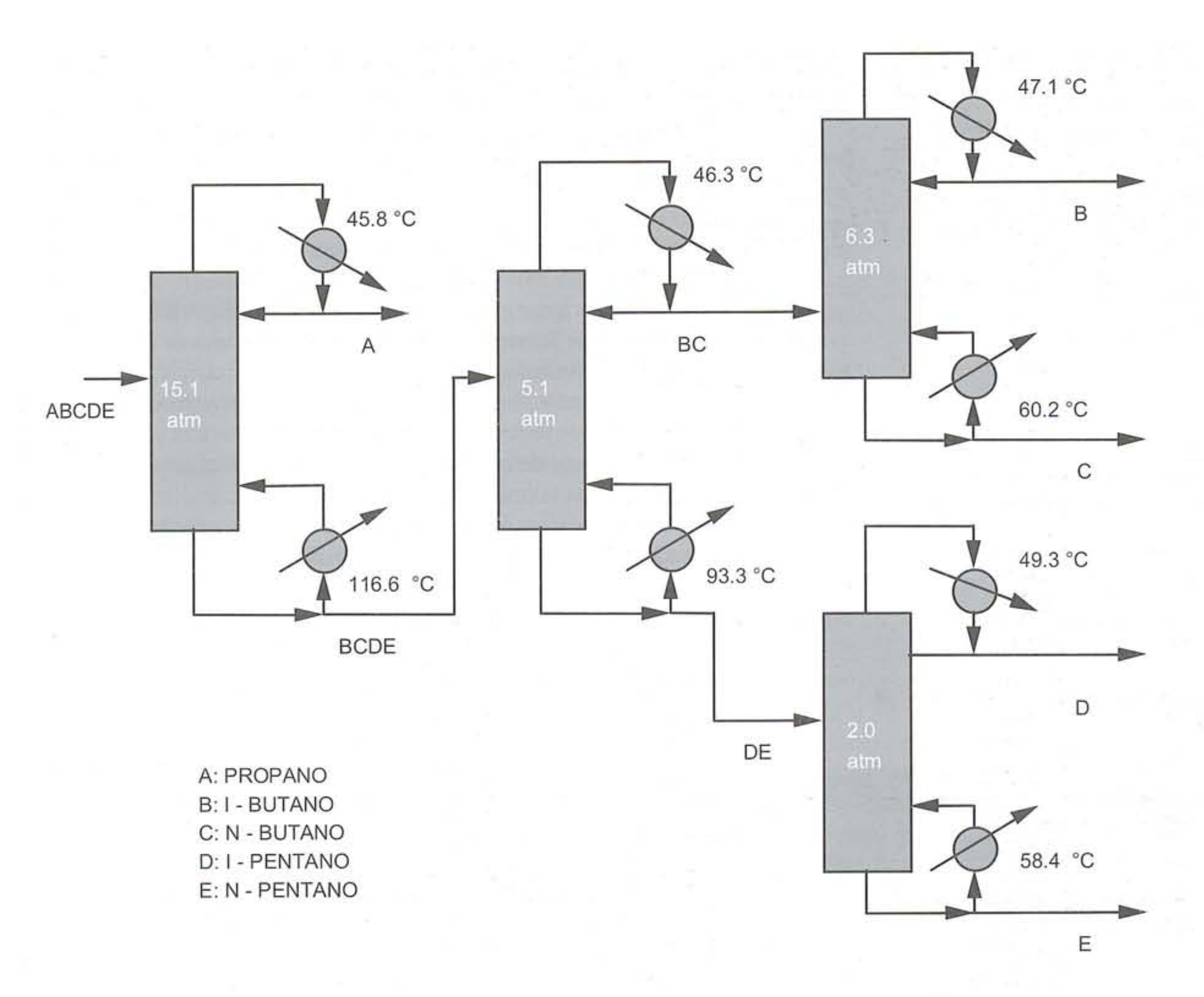


FIGURA 8.4
Secuencia de separación óptima con presión variable en cada columna.

inicial. Si alguna de las alternativas generadas de esta manera ofrece una mejor función objetivo que la original, se sustituye como la nueva aproximación a la solución óptima y se vuelven a considerar todos los posibles vecinos de esta nueva estructura. El método termina cuando ningún nuevo cambio generado al intercambiar vecinos ofrece una mejor función objetivo, o cuando la estructura resultante ha sido ya comparada con todos los posibles vecinos. En el caso de secuencias de separación, el intercambiar vecinos implica intercambiar el orden de efectuar una separación entre dos columnas adyacentes.

Las reglas heurísticas juegan un papel importante en este método debido a dos razones:

a) generan una buena secuencia inicial, y
b) reducen el espacio de búsqueda al rechazar posibles intercambios que no ofrezcan un potencial de mejorar el costo de operación del sistema.

El método de Seader y Westerberg considera las siguientes 6 reglas heurísticas:

1. Especificar las separaciones prohibidas. Las separaciones directas como destilación deben escogerse siempre que sea posible. Primero

debe fijarse la presión de diseño de la columna. Si se requiere el uso de refrigerantes en el condensador, considerar otras opciones como absorción. Por otro lado, si se requiere operar a vacío, considerar extracción líquido-líquido. Otro factor adicional es el valor de la volatilidad relativa (α) entre los componentes clave. Se considera que si α es menor que 1.05, no es económico hacer la separación mediante destilación, mientras que si α es mayor que 2 se recomienda usar destilación como método de separación debido a que difícilmente otro método va a competir económicamente. La Figura 8.5 muestra los resultados de Souders al comparar las operaciones de destilación, extracción y destilación extractiva desde un punto de vista económico. Estos resultados sirven de guía para estimar los valores de volatilidad relativa que se requieren en destilación extractiva y extracción para lograr costos de operación similares al de usar destilación con una determinada volatilidad relativa.

2. Favorecer secuencias que separan lo más fácil primero. Respetar esta regla a lo largo de todo el tren de separación.
3. Favorecer secuencias que separan el componente más abundante primero.
4. En caso de usar un agente de separación que no se encuentra en la mezcla original, eliminarlo inmediatamente.
5. Si los demás factores son iguales, favorecer secuencias que separan los componentes uno por uno en el destilado.
6. Cuando se especifiquen productos de multicomponentes, favorecer aquellas secuencias que los produzcan directamente o con un mínimo de mezclado de corrientes.

El método consiste en los siguientes pasos:

a) Después de definir los sistemas de separación, generar una secuencia inicial usando las reglas heurísticas en el orden descrito (lo cual es en

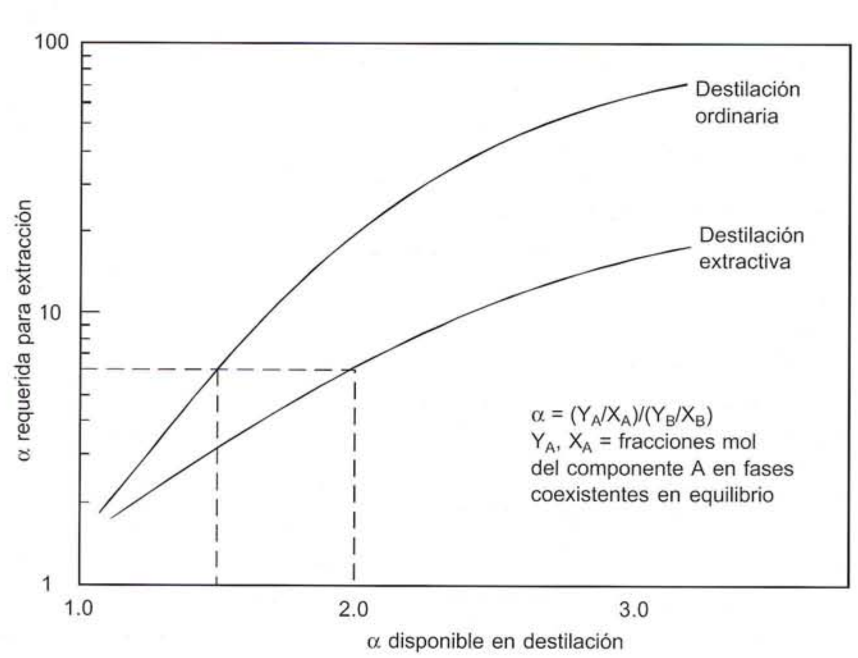


FIGURA 8.5
Análisis económico comparativo entre destilación, destilación extractiva y extracción líquido-líquido.

sí otra regla heurística). Por lo tanto, la secuencia inicial se genera favoreciendo las separaciones con mayor volatilidad relativa entre los componentes clave.

b) Aplicar técnicas evolutivas para mejorar la secuencia inicial, lo cual implica:

   1) Considerar todos los intercambios posibles entre columnas adyacentes, y
   2) Relajar la segunda regla heurístca y considerar la tercera (o las subsecuentes). Conservar la alternativa si el intercambio se favorece de acuerdo a la nueva heurística (la cual no fue considerada para generar la secuencia inicial); de otra manera, rechazarla.

El método se ejemplifica con el problema especificado en la Tabla 8.7. Se tiene una mezcla de seis componentes a separar en cuatro productos finales. Se puede observar que todas las columnas de destilación pueden operarse a una presión mayor a la atmosférica y usando agua de enfriamiento en el condensador. Entonces, la única restricción es impuesta por el valor de la volatilidad relativa; la separación C/D no conviene hacerla por destilación debido a que $\alpha = 1.03$.

Para generar la secuencia inicial, los rompimientos a considerar primero son A/B y E/F. Las volatilidades relativas de estas alternativas son bastante

Tabla 8.7
Datos del problema para la aplicación de método heurístico-evolutivo

Componentes y flujo de alimentación (kgmol/h):		
A: propano, 4.55	C: n-butano, 1.55	E: cis-buteno-2, 36.8
B: buteno-1, 45.5	D: trans-buteno-2, 48.2	F: n-pentano, 18.2
Productos deseados:		
a) A; b) BDE (butenos); c) C; d) F		
Métodos de separación:		
I Destilación ordinaria		
II Destilación extractiva con furfural		
Orden de los componentes:		
Método I: ABCDEF (A es el más volátil)		
Método II: ACBDEF		
Método I:		
$\alpha_{AB} = 2.45$	$\alpha_{BC} = 1.18$	$\alpha_{CD} = 1.03$
$\alpha_{EF} = 2.50$	$\alpha_{AC} = 2.89$	
Método II:		
$\alpha_{CB} = 1.17$	$\alpha_{CD} = 1.70$	

parecidas, de tal manera que cualquier columna puede ir primero. Si se elige primero el rompimiento A/B, lo cual tiende a las separaciones directas ampliamente usadas en la industria, el siguiente rompimiento es el de E/F. Se selecciona después el rompimiento B/C por destilación ordinaria debido a que la separación C/DE debe dejarse al último por la necesidad de eliminar en seguida el agente externo de separación que se requiere en esa columna; de otra manera, la separación del agente externo se haría en presencia de un mayor número de componentes, lo cual aumentaría el costo total del sistema. Para esta secuencia inicial, el costo de operación es de 878,000 $/año (ver Figura 8.6).

Por reglas evolutivas, los siguientes intercambios son posibles:

a) (A/B...) con (...E/F)
b) (...E/F) con (B/C...)
c) (B/C...) con $(C/D)_{II}$

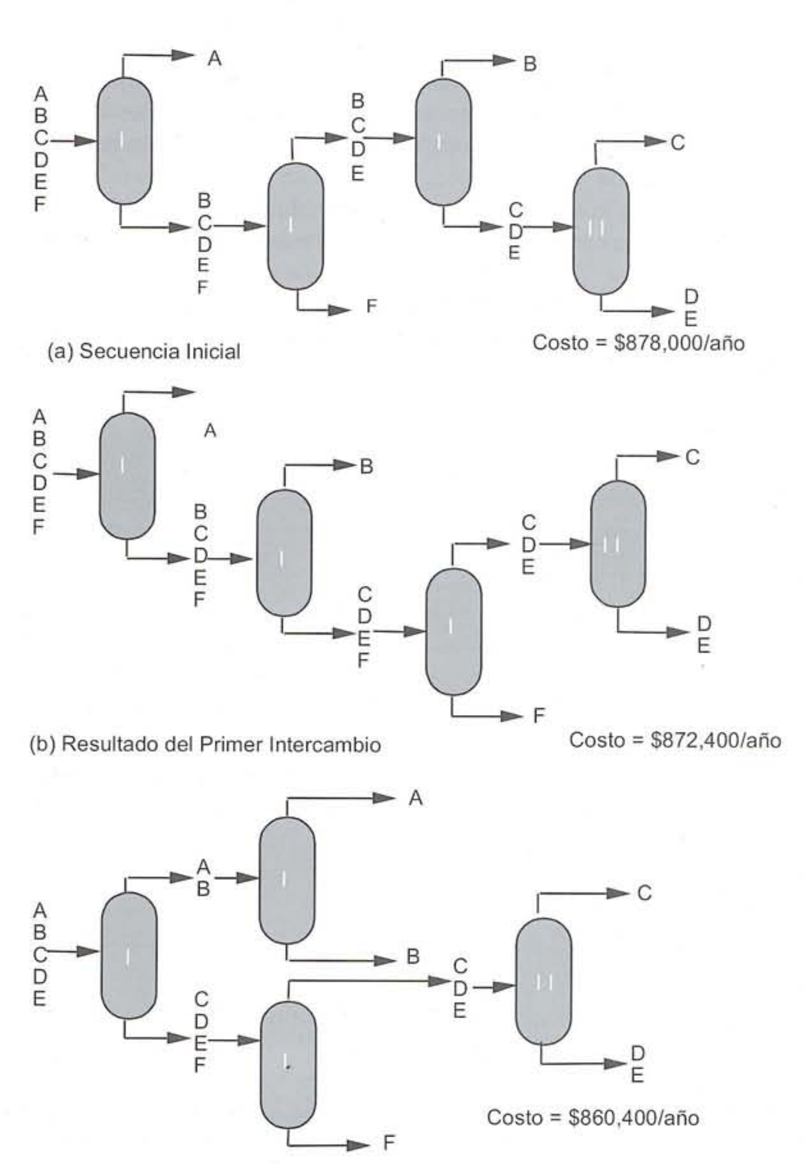


FIGURA 8.6
Aplicación del método heurístico-evolutivo.

El primer intercambio podría tener un ligero efecto sobre el costo de operación del sistema debido a la mayor cantidad de F que de A; sin embargo, el intercambio (b) parece ofrecer mayor potencial ya que la cantidad de B es apreciablemente mayor que la cantidad de F, lo cual favorece la tercera regla heurística. Finalmente, el intercambio (c) no parece tener potencial por la necesidad de separar el agente externo de separación al final. Haciendo el segundo intercambio solamente, se genera la secuencia (b) mostrada en la Figura 8.6, la cual tiene un mejor costo de operación (872,400 $/año).

Los nuevos intercambios viables son:

d) (A/B...) con (.B/C..)
e) (..E/F) con $(C/D.)_{II}$

El intercambio (d) puede tener ventajas ya que el componente B está presente en mayor cantidad que A, mientras que el intercambio (e) no conviene puesto que debe dejarse el rompimiento C/D por destilación extractiva al final, como se mencionó anteriormente. El intercambio (d) proporciona la secuencia (c) de la Figura 8.6. El costo de operación disminuye a 860,400 $/año. Todos los posibles intercambios de esta nueva secuencia ya han sido analizados; por lo tanto, esta secuencia constituye la solución óptima al problema. Hendry y Hughes resolvieron este problema usando programación dinámica, y el resultado coincide con el obtenido por este método heurístico-evolutivo, mediante el cual se tuvo la necesidad de diseñar ocho diferentes columnas, comparadas con las 64 que Hendry y Hughes requirieron con programación dinámica, no obstante que su espacio de búsqueda se redujo al prohibir las separaciones $(A/C..)_{II}$ y $(..E/F)_{II}$.

8.8 Un método rápido

Con la aplicación de métodos algorítmicos se han detectado secuencias de separación óptimas. Al revisar las reglas heurísticas y su posible ingerencia para explicar la estructura de secuencias óptimas, puede encontrarse que en la mayoría de los casos las secuencias que minimizan el consumo de servicios tienden a minimizar el costo anual del sistema. Entonces, se puede utilizar una regla heurística que cumpla con este objetivo y es de esperarse que la estructura que se genere sea óptima o una excelente aproximación al óptimo.

Un método rápido para la síntesis de trenes de separación consiste en buscar la alternativa que minimice los flujos de alimentación a la secuencia:

$$Min \sum_{i=1}^{n} F_i$$

donde F_i es la alimentación a cada una de las n columnas que contiene la secuencia que separa n + 1 componentes. Esta función objetivo es parte de un problema de optimización bastante simple, que puede resolverse manualmente por principios como programación dinámica, métodos evolutivos o inclusive mediante simple inspección en algunos casos. Una vez que la estructura óptima se detecta, cada columna deberá diseñarse, para lo cual las variables de presión

y razón de reflujo a su vez pueden establecerse por las heurísticas que se han tratado en este capítulo. El resultado es una excelente solución, obtenida mediante la aplicación de reglas heurísticas para secuencias de separación y para el diseño de las columnas individuales, con un esfuerzo de cómputo notablemente inferior al requerido si se formula un problema de optimización formal.

El método de síntesis consiste de los siguientes tres pasos:

1. Definir el sistema de separación. Usar de preferencia destilación, de acuerdo a los criterios sugeridos en el método de Seader y Westerberg. En caso de que alguna separación no sea conveniente realizarla mediante destilación, dejar ese rompimiento hasta el final de la secuencia, o tan cercano al final como sea posible.
2. Para el rango de aplicación de destilación, detectar la secuencia que minimiza los flujos de alimentación a todas las columnas. La aplicación de algún método de optimización está abierta en este punto.
3. En caso de que se produzcan varias soluciones con el mismo valor de la función objetivo, elegir aquella que realice la separación más fácil primero.

Para ilustrar la aplicación de este método simple, consideremos el problema mostrado en la Tabla 8.4, y que fue resuelto mediante programación dinámica con la función objetivo de minimizar el costo total anual de la secuencia. No existen separaciones prohibidas, por lo cual se puede usar destilación para la separación de cualquier subgrupo que se genera. Para generar la estructura inicial, consideremos primero la separación del componente más abundante (E) seguida por el corte AB/CD. El esquema resultante se muestra en la Figura 8.7. El valor de la función objetivo es de 2086.56 kmol/hr. Para corroborar si esta estructura es la óptima (con respecto a la función objetivo de minimizar los flujos totales de alimentación a las columnas), se pueden usar los principios evolutivos cubiertos anteriormente, a partir de los cuales se pueden generar los siguientes posibles intercambios entre puntos vecinos:

1.a) (...D/E) con (.B/C.)
1.b) (.B/C.) con (A/B...)
1.c) (.B/C.) con (C/D.)

Si se hace el primer intercambio, la función objetivo se deteriora a un valor de 2222.64 kmol/hr. El segundo intercambio claramente genera una peor alternativa y no necesita considerarse. El tercer intercambio provee una estructura con un valor de la función objetivo de 2086.56 kmol/hr, el cual es similar al de la estructura inicial. La Figura 8.8 muestra esta secuencia, la cual se examina de la misma manera.

Los nuevos intercambios factibles para la alternativa de la Figura 8.8 son:

1.d) (...D/E) con (.C/D.)
1.e) (.B/C.) con (A/B.)

Sólo el intercambio 1.d muestra potencial para mejorar la secuencia. Este intercambio resulta en el diagrama de flujo de la Figura 8.9, la cual genera un mejor valor de la función objetivo de 1995.84 kmol/hr. No existen intercambios adicionales que se pueden generar mediante principios evolutivos, por lo que esta secuencia es la solución óptima.

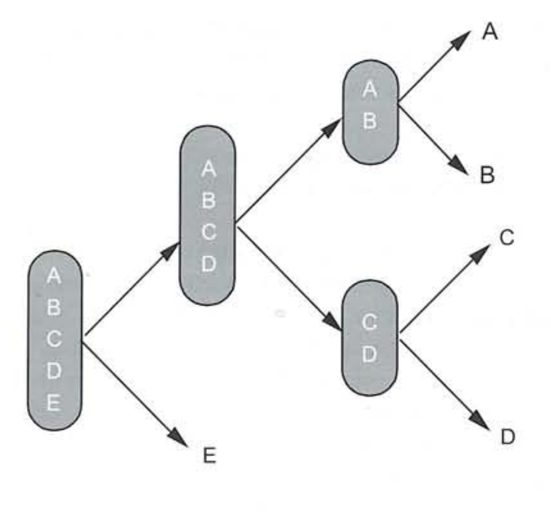


FIGURA 8.7
Secuencia inicial.

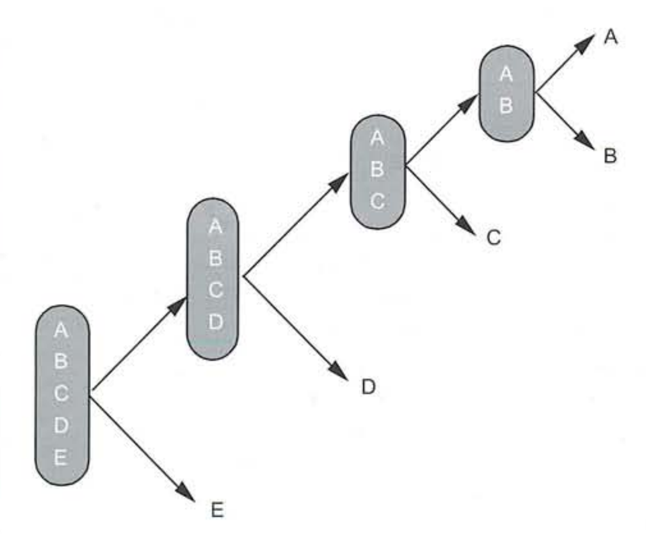


FIGURA 8.8
Secuencia obtenida después del primer intercambio.

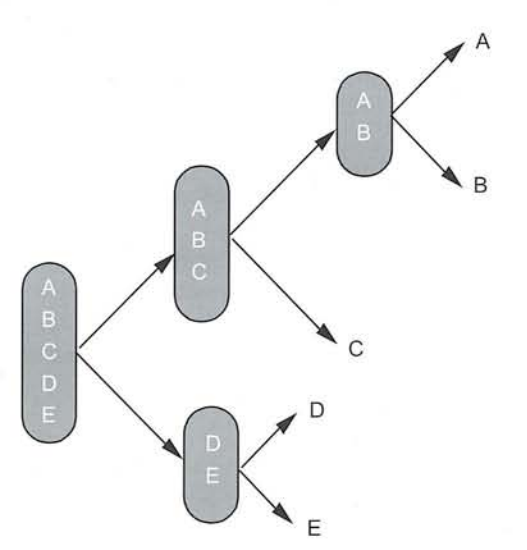


FIGURA 8.9
Secuencia final y óptima.

Para este problema en particular, el lector puede usar los resultados de la Tabla 8.6 para comparar la desviación de la solución óptima reportada mediante el uso de programación dinámica con la estructura recomendada por este método heurístico.

Cabe resaltar que en este ejemplo se han usado los principios evolutivos en búsqueda de la solución óptima, pero que esto no es restrictivo para encontrar la solución buscada, pues la función objetivo es bastante simple y en ocasiones el óptimo puede encontrarse por inspección o al comparar directamente todo el conjunto de soluciones factibles del problema. La secuencia encontrada implica el diseño posterior de las columnas de destilación, los cuales pueden también simplificarse mediante el uso de las reglas para fijar presiones y razones de reflujo que se han mostrado en este capítulo. El resultado es que tanto la secuencia de separación como los diseños de las columnas se obtienen de una manera ágil, y proporcionan una excelente alternativa con un mínimo de esfuerzo.

8.9 ANÁLISIS DE SISTEMAS DE DESTILACIÓN COMPLEJOS

Los trenes de destilación que se han diseñado hasta este punto están basados en columnas convencionales que implican una alimentación y dos productos (destilado y fondos). Debido a que el agente de separación para esta operación unitaria es el calor, al hacer el análisis del consumo de energía en un proceso químico es común que los equipos de destilación contribuyan de manera importante al consumo total. Esto ha ocasionado una búsqueda de esquemas alternos que ocasionen un menor costo de operación debido a una mejor eficiencia en el consumo de energía. Tales esquemas se conocen como columnas de destilación térmicamente acopladas. Aunque el diseño detallado de estos esquemas está fuera del alcance de este libro, en esta sección presentamos los resultados que reportaron Tedder y Rudd al comparar ocho diseños diferentes que pueden usarse para la separación de mezclas de tres componentes ABC. Los diseños considerados se muestran en la Figura 8.10.

Los dos primeros diseños corresponden a las secuencias convencionales directa e indirecta. El diseño III es una columna con rectificador lateral y el diseño IV es una columna con agotador lateral. El diseño V usa un prefraccionador que distribuye el componente intermedio en dos alimentaciones a una columna principal de donde se extraen A y C como domo y fondos, y B mediante una extracción lateral. Los diseños VI y VII usan una columna para separar los tres componentes, variando el punto en que se extrae B con respecto al punto de alimentación. Finalmente, el diseño VIII usa tres columnas de destilación convencionales, usando la primera como prefraccionador y las otras dos para separar las alimentaciones binarias que se generaron en la primera columna.

El elaborado desarrollo de este estudio en el cual se detectaron las estructuras óptimas de separación para mezclas ternarias de diferentes componentes y con diferentes alimentaciones se resume en dos nomogramas que usan un índice de factibilidad de separación como parámetro:

$$IFS = \frac{\alpha_{AB}}{\alpha_{BC}}$$

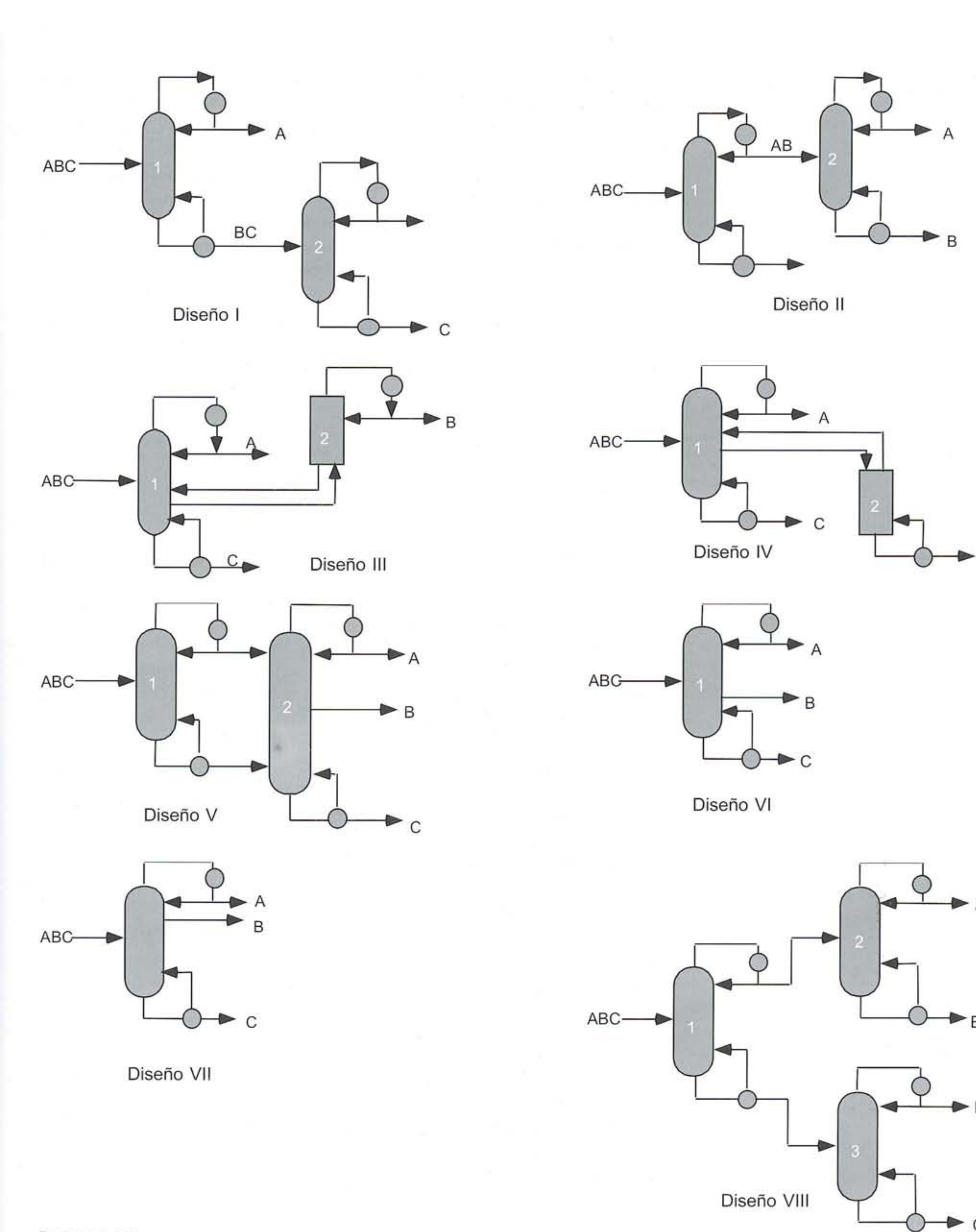


FIGURA 8.10
Ocho diseños comparados para separar mezclas ternarias.

Si este índice es mayor que uno, indica que la separación entre A y B es más fácil que la separación entre B y C, y viceversa. Las figuras 8.11 y 8.12 reproducen las regiones de optimalidad que reportaron Tedder y Rudd como resultado de su estudio. A partir de estas figuras, usando el valor del IFS y la composición de la alimentación como parámetros se puede obtener de manera directa el diseño recomendado para llevar a cabo la separación.

El esquema detectado debe diseñarse posteriormente en detalle. Se han publicado algunos métodos para el diseño de sistemas de destilación térmicamente acoplados, como se indica en las referencias.

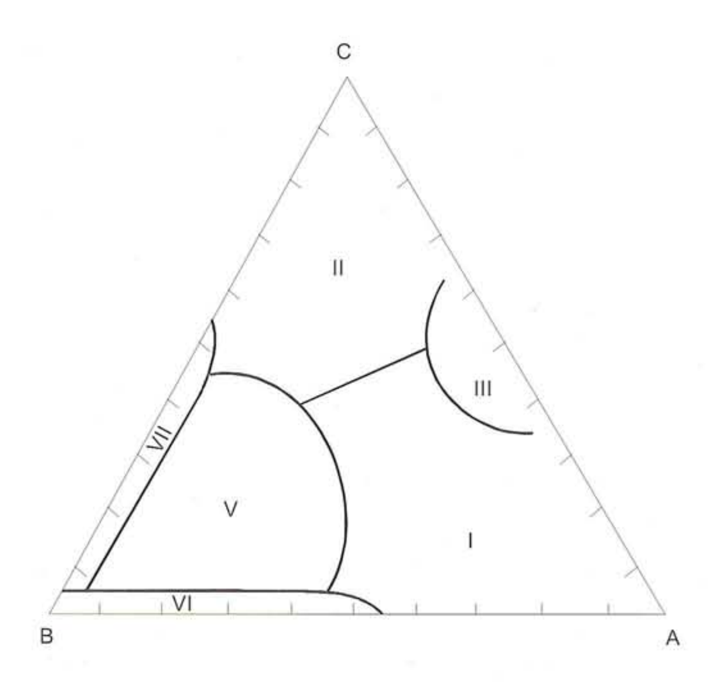


FIGURA 8.11
Regiones esperadas de optimalidad para IFS < 1.6.

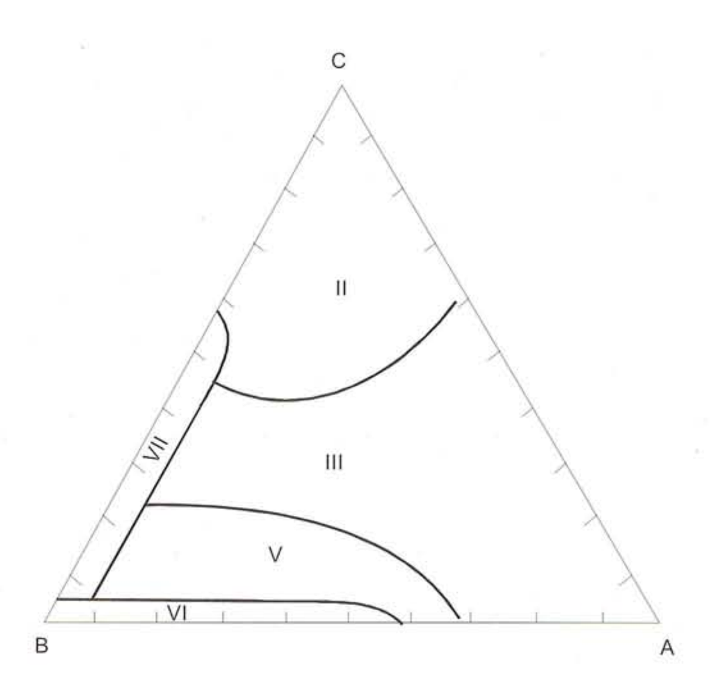


FIGURA 8.12
Regiones esperadas de optimalidad para IFS > 1.6.

Una cobertura bastante completa sobre el diseño y análisis de procesos de separación está disponible en

King, C.J., *Separation Processes*, McGraw Hill (1973).

El problema de optimización de una columna de destilación binaria fue tomado de

Peters, M.S. y K.D. Timmerhaus, *Plant Design and Economics for Chemical Engineers,* 3a. ed., McGraw-Hill (1980).

Las ecuaciones de diseño para columnas de destilación fueron reportadas por

Heaven, D.L., "Optimum Sequencing of Distillation Columns in Multicomponent Fractionation", M.S. Thesis, Universidad de California, Berkeley (1969).

Las reglas heurísticas descritas en este trabajo para sistemas de separación se pueden localizar en

Rudd, D.F., G.J. Powers y J.J. Siirola, *Process Synthesis*, Prentice Hall (1973).

El uso de la técnica de programación dinámica para sistemas de separación puede encontrarse en

Hendry, J. y R. Hughes, "Generating Separation Process Flowsheets", *Chem. Eng. Prog.*, 68, 6, 71 (1972).
Rathore, R.N.S., K.A. VanWormer y G.J. Powers, "Synthesis Strategies for Multicomponent Systems with Energy Integration", *AIChE J*, 20, 491 (1974).
Rathore, R.N.S., K. A. VanWormer y G.J. Powers, "Synthesis of Distillation Systems with Energy Integration", *AIChE J*, 20, 5, 940 (1974).
Tiscareño, F. y A. Jiménez, "Síntesis Algorítmica de Sistemas de Separación", *Ingeniería Química*, España, 172 (mayo de 1988).

El enfoque algorítmico-evolutivo se puede localizar en

Seader, J.D. y A. Westerberg, "A Combined Heuristic and Evolutionary Strategy for Synthesis of Simple Separation Sequences", *AIChE J.*, 23, 6, 951 (1977).

Una comparación de costos entre destilación, extracción y destilación extractiva puede encontrarse en

Souders, M., "The Countercurrent Separation Process", *Chemical Engineering Progress*, 60, 2, 75 (1964).

El método rápido basado en la minimización de flujos fue publicado en

Jiménez, A., "A Simplified Heuristic-Evolutionary Method for the Synthesis of Separation Processes", *Latin American Applied Research*, 29, 99-105 (1999).

El análisis de optimización de diferentes secuencias de separación incluyendo arreglos complejos se publicó en

Tedder, D.W. y D.F. Rudd, "Parametric Studies in Industrial Distillation", *AIChE Journal*, 24, 2, 303 (1978).

Métodos de diseño para arreglos de destilación con acoplamiento térmico se pueden encontrar en

Fidkowski, Z. y L. Krolikowski, "Thermally Coupled System of Distilation Columns: Optimization Procedure", *AIChE Journal*, 32, 4, 537 (1986).
Triantafyllou, C. y R. Smith, The Design and Optimization of Fully Thermally Coupled Distillation Columns", *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 70, 118 (1992).
Finn, A.J., "Consider Thermally Coupled Distillation", *Chem. Eng. Progr.*, 10, 41 (1993).
Hernández, S. y A. Jiménez, "Design of Optimal Thermally Coupled Distillation Systems Using a Dynamic Model", *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 76, 319 (1996).
Hernández, S. y A. Jiménez, "Design of Energy-Efficient Petlyuk Systems", *Comput. Chem. Eng.*, 23, 8, 1005 (1999).

PROBLEMAS

8.1 Considere el proceso de producción de cloruro de vinilo mostrado en el Ejemplo 7.1. Esboce los sistemas de separación requeridos para expandir el diagrama de flujo. Discuta la razón por la cual se propone cada método de separación que incluya en dicho diagrama. Incluya en dicho ensayo el escenario en el cual el ácido clorhídrico se oxida para regenerar cloro, una de las materias primas del proceso.

8.2 Considere el proceso de producción de acetato de isopropilo basado en la esterificación del ácido acético con el alcohol isopropílico:

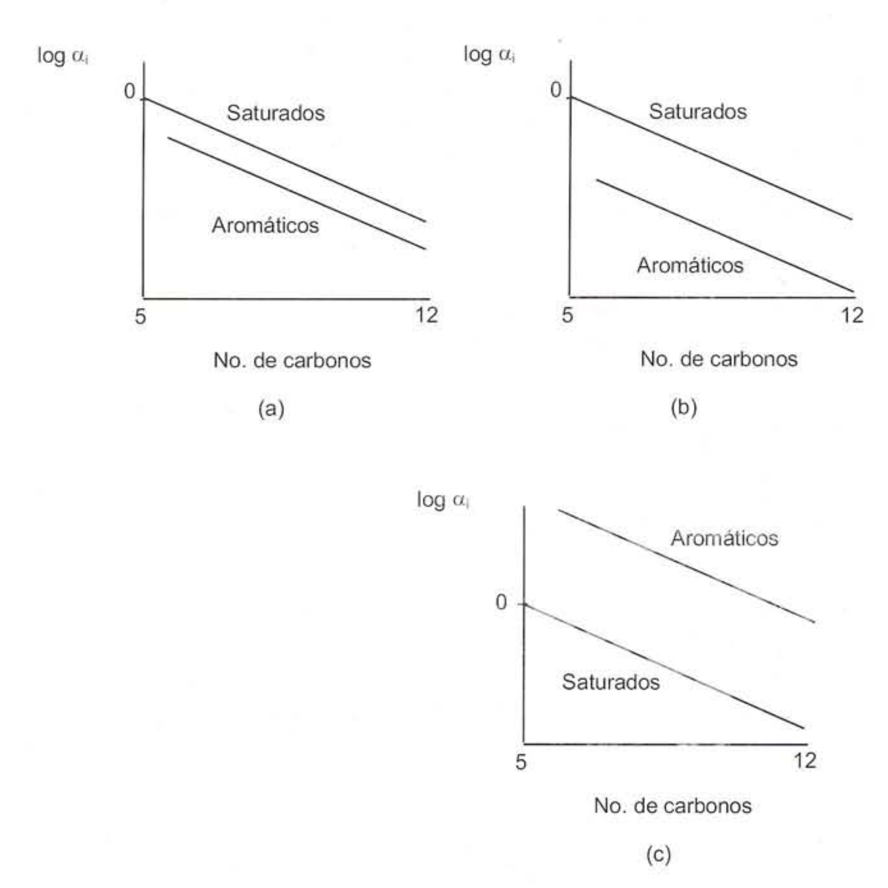
$$\text{Alcohol} + \text{Ácido} \rightarrow \text{Acetato de isopropilo} + \text{Agua}$$

La reacción presenta un 60% de conversión.

a) Si se usa un sistema de separación para reciclar las cantidades que no reaccionan, calcule los flujos necesarios de alimentación fresca y la alimentación total al reactor. Tome como base 100 moles de alimentación de cada reactivo al reactor.
b) Basado en precios de productos y materias primas, ¿tiene potencial el proceso? Consulte el *Chemical Marketing Reporter*.
c) Basado en algún criterio heurístico, proponga un sistema de separación. Muestre el diagrama de flujo resultante.

8.3 En la producción de varios hidrocarburos aromáticos a menudo se requiere obtener los aromáticos (una mezcla de benceno, tolueno y xilenos) a

partir de una mezcla de hidrocarburos saturados, no saturados y aromáticos de una gran variedad de pesos moleculares que salen de una planta de reformado de gasolinas. La figura muestra cualitativamente la volatilidad relativa de varios compuestos saturados y aromáticos con respecto al n-pentano como una función del número de carbonos en el compuesto. La siguiente figura muestra el efecto de agregar un solvente para realizar una destilación extractiva. La tercera figura ilustra el efecto de agregar un solvente para llevar a cabo una operación de extracción líquido-líquido.



Factores de separación para hidrocarburos del C_5 al C_{12} saturados y aromáticos. (a) Destilación ordinaria. (b) Destilación extractiva. (c) Extracción.

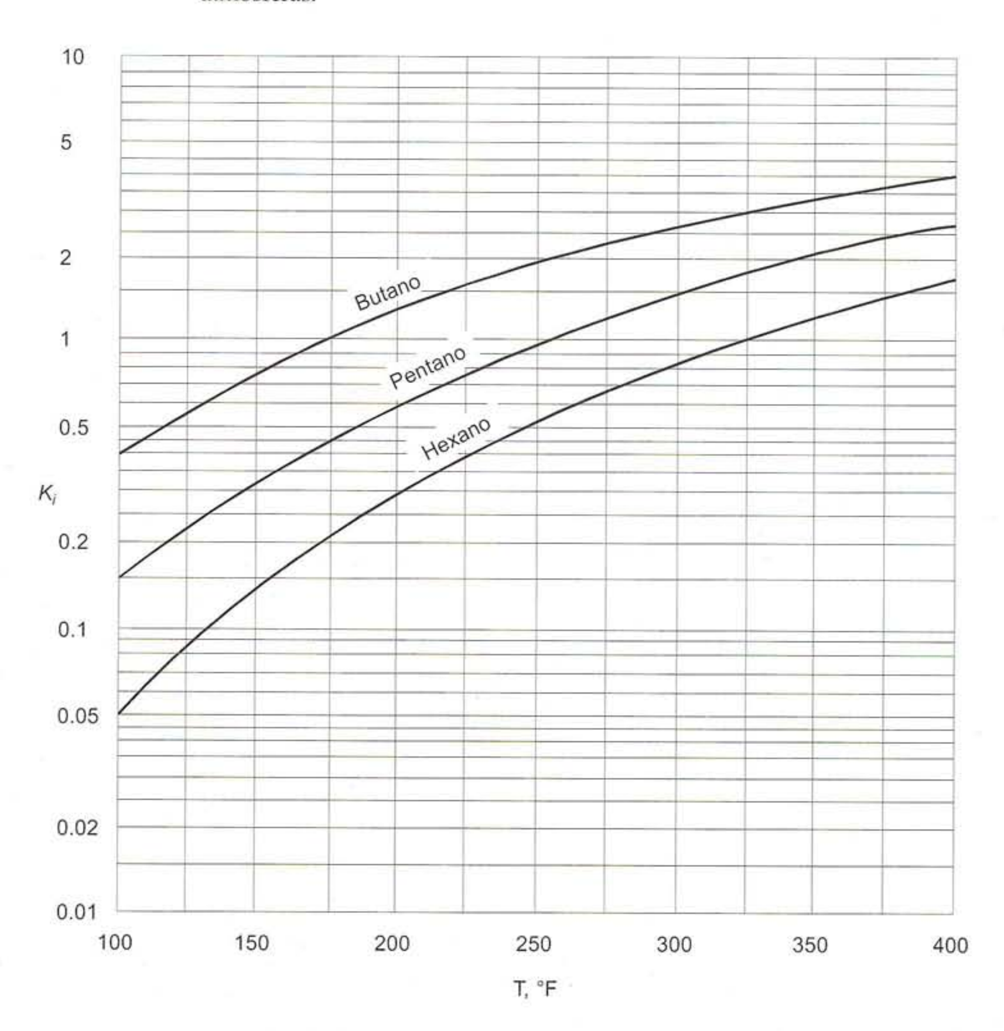
a) Discuta cualitativamente las posiblidades de efectuar la separación mediante estas alternativas.
b) Proponga un diagrama de flujo, basado en esta información, que separe los componentes deseados.

Para el caso de extracción, la α_i se define como la relación de concentraciones en la fase de solvente a la fase de hidrocarburo.

8.4 Se tiene una mezcla de butano, pentano y hexano, la cual se quiere separar por destilación a 10 atmósferas. La alimentación es líquido saturado con composición (A,B,C) = (0.35, 0.4, 0.25). Se desea efectuar el rompimiento A/BC, con un 98% de recuperación de los componentes clave.

a) Calcule las temperaturas de alimentación, domo y fondo de la columna.
b) Use la ecuación de Fenske y estime el número mínimo de etapas.
c) Aplique la ecuación de Underwood para determinar la razón de reflujo mínima requerida para llevar a cabo la separación.
d) Suponiendo una razón de reflujo de diseño igual a 1.2 veces la mínima, estime el número de etapas requeridas a partir de la relación de Gilliland.

La siguiente gráfica muestra las propiedades de los componentes a 10 atmósferas.



Coeficientes de distribución a 10 atm.

8.5 Repita el problema 8.4 para la separación AB/C.

8.6 Diseñe una columna de destilación para procesar 500 Kg mol/hr de una mezcla de los siguientes componentes:

A (i-C_4H_{10})	0.2
B (n-C_4H_{10})	0.3
C (i-C_5H_{12})	0.3
D (n-C_5H_{12})	0.2

Existen 10 diferentes columnas de destilación que pueden considerarse a partir de esta mezcla: A/B, B/C, C/D, A/BC, AB/C, B/CD, BC/D, A/BCD, AB/CD y ABC/D. Escoja uno de estos casos y calcule el costo de operación ($/año) de la columna para dos valores de la razón de reflujo:

a) $R = 1.1\ R_{min}$
b) $R = 1.2\ R_{min}$

Suponga una presión de diseño de 300 psia, para la cual se aplican las siguientes relaciones termodinámicas.

Datos de equilibrio:

$$(K_i/T)^{1/3} = a_{1i} + a_{2i}\ T + a_{3i}\ T^2 + a_{4i}\ T^3$$

Componente	$a_1 \times 10^2$	$a_2 \times 10^5$	$a_3 \times 10^8$	$a_4 \times 10^{12}$
i-C_4H_{10}	−18.97	61.24	−17.89	−90.86
n-C_4H_{10}	−14.18	36.87	16.52	−248.2
i-C_5H_{12}	−7.55	3.26	58.51	−414.9
n-C_5H_{12}	−7.54	2.06	59.14	−413.1

Datos de entalpia:

Para líquidos, $(h_i)^{1/2} = c_{1i} + c_{2i}\ T + c_{3i}\ T^2$ (T en °R), Btu/lb mol
Para vapores, $(H_i)^{1/2} = e_{1i} + e_{2i}\ T + e_{3i}\ T^2$ (T en °R), Btu/lb mol

Componente	c_1	$c_2 \times 10$	$c_3 \times 10^4$
i-C_4H_{10}	−16.55	2.16	−3.15
n-C_4H_{10}	−20.3	2.3	−3.87
i-C_5H_{12}	−23.36	2.5	−4.39
n-C_5H_{12}	−24.37	2.56	−4.65

Componente	e_1	$e_2 \times 10^4$	$e_3 \times 10^6$
i-C_4H_{10}	147.6	−1185	152.9
n-C_4H_{10}	152.7	−1153	146.6
i-C_5H_{12}	131	−198	82.5
n-C_5H_{12}	128.9	2.05	64.5

Fuente: Charles D. Holland, *Fundamentals of Multicomponent Distillation*, McGraw-Hill (1981).

Use los datos de diseño y evaluación económica reportados por Tiscareño y Jiménez. Escriba explícitamente cualquier suposición adicional que haga.

8.7 Para la mezcla dada en el problema anterior, escoja una de las separaciones viables y encuentre la razón de reflujo óptima que minimiza el costo total anual de la columna de destilación. Mantenga fija la presión de diseño a 300 psia.

8.8 El cloruro de alilo es un compuesto químico de notable valor, usado para la producción de glicerol y otras especialidades químicas. Para producirlo, se utiliza la cloración del propileno:

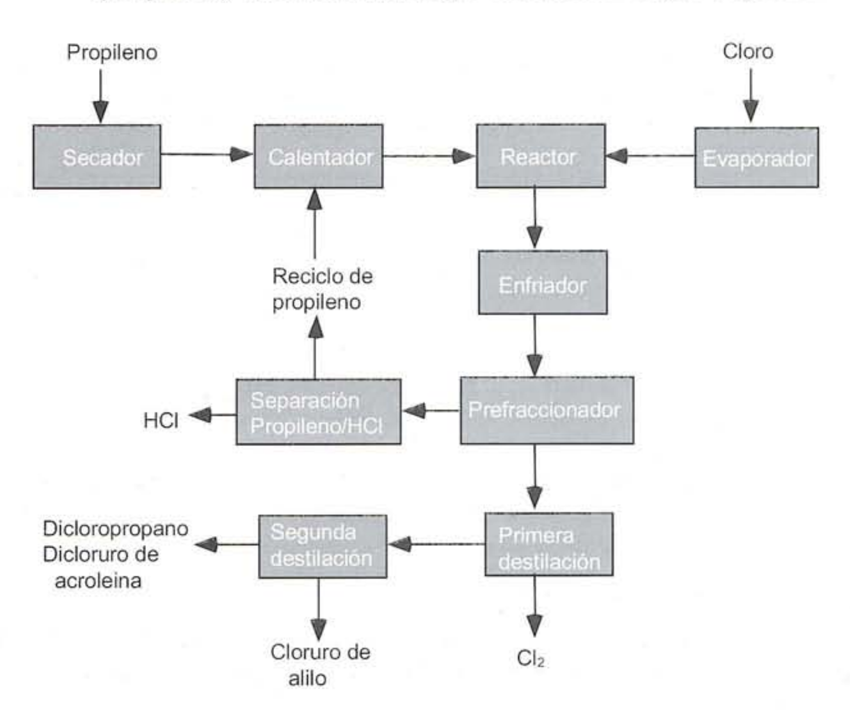
$$C_3H_6 + Cl_2 \rightarrow C_3H_5Cl + HCl$$

Esta reacción se lleva a cabo a 300°C con 100% de exceso de propileno, y está acompañada de otras reacciones secundarias que producen varios compuestos clorados. En la tabla adjunta se muestran la composición de salida del reactor, los puntos de ebullición y solubilidades en agua. Se desea separar el cloruro de alilo puro y reciclar las corrientes de propileno y cloro al reactor.

Compuesto	Cantidad relativa (en base de peso)	Punto de ebullición	Solubilidad en agua (% en peso)
A. 1,3 Dicloropropano	0.2	112	Insoluble
B. Dicloruro de acroleina	1.8	84	Insoluble
C. Cloruro de alilo	9.3	50	0.33
D. Cloro	3	-34	1.46
E. Propileno	105	-48	0.89
F. Acido clorhídrico	93	-85	72

Basado principalmente en las reglas heurísticas que se indican, proponga los esquemas resultantes de separación.

a) Separar los componentes más abundantes primero.
b) Hacer las separaciones más difíciles al final.
c) Separar los compuestos de bajo punto de ebullición primero.
d) Separar los compuestos corrosivos primero.
e) Basado en un análisis de los esquemas anteriores, sugiera un proceso de separación final para esta mezcla.
f) A continuación se muestra un proceso comercial publicado en *Encyclopedia of Chemical Technology*, Vol. 5, John Wiley, 1964, p. 211.



Analice este proceso industrial, y compárelo con los esquemas generados a partir de reglas heurísticas.

g) ¿Cómo podrían usarse de manera efectiva las diferencias de solubilidad en agua?

8.9 Se tiene una mezcla de 4 componentes, y se consideran dos opciones para diseñar una secuencia de separación, destilación (Opción I) y destilación extractiva (Opción II). Los datos del problema se dan a continuación.

Flujo: 1,000 lb mol/hr

Composición		Para opción I:	Para opción II:
A	0.1	$\alpha_{AB} = 2$	$\alpha_{AB} = 2.1$
B	0.2	$\alpha_{BC} = 1.5$	$\alpha_{BC} = 1.5$
C	0.3	$\alpha_{CD} = 1.02$	$\alpha_{CD} = 1.4$
D	0.4		

Los costos de operación anuales pueden aproximarse mediante los siguientes modelos reducidos:

Opción I: Costo = $50\ F/\alpha$
Opción II: Costo = $60\ F/\alpha$

donde F es la alimentación total a cada columna y α es la volatilidad relativa entre componentes clave.

Use programación dinámica y obtenga la secuencia de separación óptima.

8.10 Se desea separar una mezcla de tres componentes en sus compuestos puros. El flujo de alimentación original es de 100 kgmoles/h y la composición molar de la mezcla es A = 0.4, B = 0.3, C = 0.3.

Se consideran dos opciones de separación: método I, destilación ordinaria, y método II, destilación extractiva con furfural. El método II consiste en agregar furfural, un nuevo compuesto, a la mezcla original para cambiar el valor de las volatilidades relativas de los componentes para luego alimentarlos a una columna de destilación. El orden de volatilidad para cada método de separación es como sigue:

Método I: ABC (p.e. A es la más volátil y C es el más pesado)
Método II: ACB

Los valores de volatilidades para cada método son:

Método I	$\alpha_{AB} = 1.1$	$\alpha_{BC} = 2.5$	$\alpha_{AC} = 1.5$
Método II	$\alpha_{AC} = 3.0$	$\alpha_{CB} = 3.0$	$\alpha_{AB} = 2.5$

Los costos de operación para cada separador pueden estimarse mediante los siguientes modelos reducidos:

Método I: $C_I = 1500\ F/\alpha_I$
Método II: $C_{II} = 2500\ F/\alpha_{II}$

En estos modelos, C se obtiene en \$/año, F es el flujo de alimentación a cada columna en kgmol/h, y α es la volatilidad relativa entre los

componentes clave para cada método de separación. Usando programación dinámica, encuentre la secuencia de separación óptima. Indique el diagrama de flujo de la secuencia óptima, así como su costo de separación.

8.11 Se desea separar una mezcla de cuatro componentes en productos esencialmente puros. La mezcla original consiste de 1,000 kgmol/h con una composición molar de ABCD = (0.3, 0.2, 0.4, 0.1). Se consideran dos métodos de separación, destilación ordinaria (I) y destilación extractiva (II). El orden de componentes volátiles para cada propiedad es:

(I): ABCD (II): ACBD

Los valores de volatilidades relativas promedio entre los diferentes componentes de la mezcla se dan a continuación.

	AB	AC	AD	BC	BD	CD
α_I	2.0	2.5	3.5	1.5	2.0	1.2
α_{II}	2.5	1.7	3.5	1.8	1.5	2.0

Suponga que los costos de operación para cada alternativa se describen mediante los siguientes modelos reducidos.

Método I: $$C_I = 10\left(\frac{F}{\alpha}\right)^{1.5}$$

Método II: $$C_{II} = 1\left(\frac{F}{\alpha}\right)^{2}$$

Utilizando programación dinámica, obtenga la secuencia óptima de separación.

8.12 Se desea separar una mezcla de 5 componentes en sus componentes escencialmente puros. El flujo total de la mezcla original de los 5 componentes es 1,000 mol/hr y la fracción mol de la alimentación es (A, B, C, D, E) = (0.2, 0.4, 0.1, 0.1, 0.2).

Se consideran dos métodos, I (destilación) y II (destilación extractiva con fenol). El orden de volatilidad relativa para cada caso es

I : ABCDE II : ACBDE (A es el más volátil)

Los valores de volatilidad relativa son:

I: $\alpha_{AB} = 2$ $\alpha_{BC} = 1.7$ $\alpha_{CD} = 1.5$ $\alpha_{DE} = 1.04$
II: $\alpha_{AC} = 2.5$ $\alpha_{CB} = 2$ $\alpha_{BD} = 2$ $\alpha_{DE} = 1.7$
$\alpha_{AB} = 2.4$

Para estimación del costo de operación de cada alternativa, se pueden usar los siguientes modelos reducidos:

Propiedad I : $C_I = 100\ F/\alpha_I$
Propiedad II : $C_{II} = 150\ F/\alpha_{II}$

donde F es la alimentación total a cada columna.

Use el método heurístico-evolutivo de Seader y Westerberg para encontrar la mejor secuencia de separación.

8.13 Se desea separar una mezcla de hidrocarburos ABC, donde

A = hexano B = heptano C = octano

Considere la columna que hace el rompimiento A/BC. Estime una presión de diseño de la columna que minimice su costo de operación.

Datos de diseño:

Flujo de alimentación: 1,000 mol/hr
Composición: 0.5, 0.3, 0.2 = (A, B, C)

Se desea una separación del 98% de los componentes clave. Se anexan propiedades termodinámicas. Indique explícitamente cualquier suposición que haga.

8.14 Una mezcla de cuatro componentes, ABCD, se desea separar mediante destilación. El flujo de alimentación es de 100 kgmol/h y la composición de la mezcla es de (A, B, C, D) = (0.2, 0.1, 0.3, 0.3). Se desea encontrar la secuencia de separación que minimice los flujos de alimentación a las columnas. Formule el caso como un problema de programación dinámica y encuentre esa secuencia de separación.

8.15 Se desea separar la mezcla ABCD en sus componentes puros. El flujo total de la mezcla es de 1,000 mol/hr, y la composición en fracción mol es como sigue:

A: 0.1 B: 0.5 C: 0.3 D: 0.1

Se consideran dos propiedades para separar la mezcla:

Método I : Destilación ordinaria
Método II : Destilación extractiva

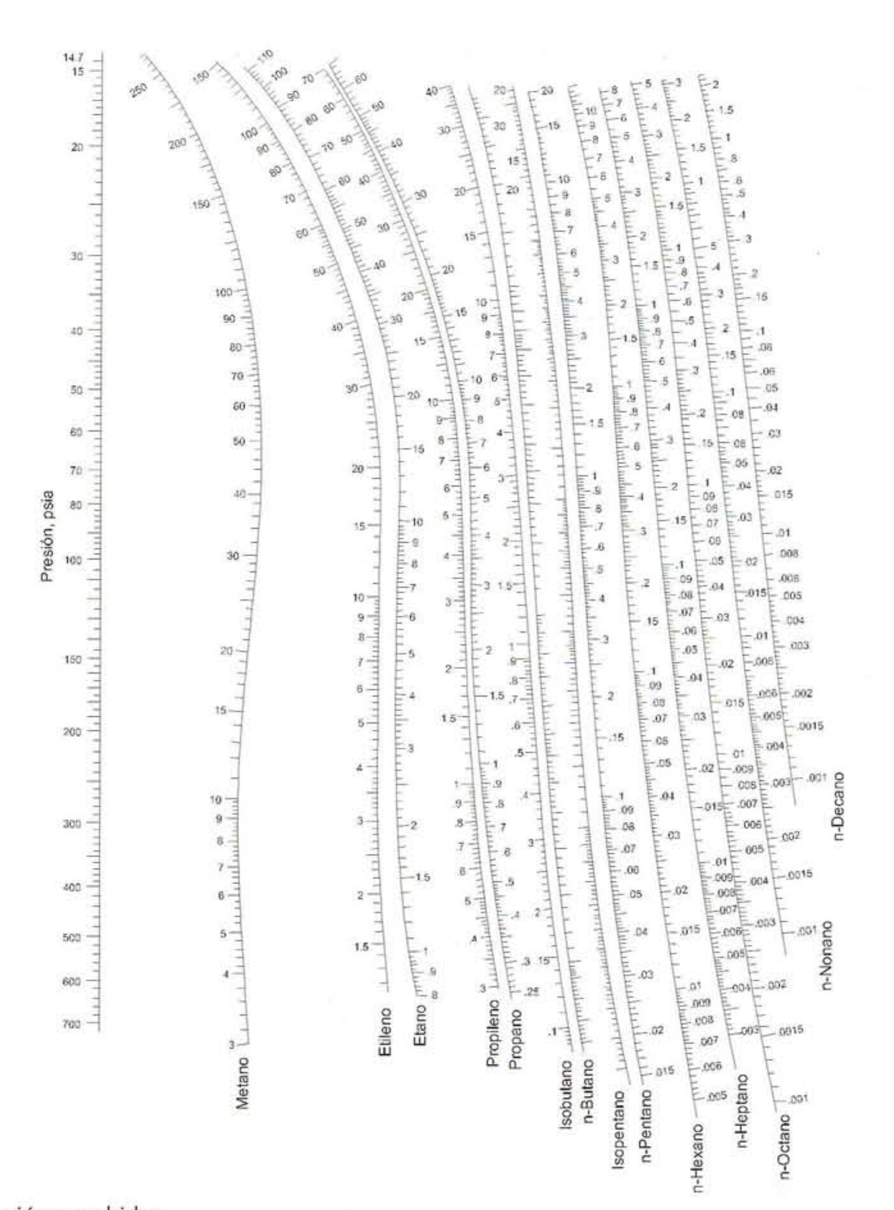
Se tienen los siguientes valores de las volatilidades relativas:

Método I : $\alpha_{AB} = 3.0\ \alpha_{BC} = 2.5 \quad \alpha_{CD} = 1.04$
Método II : $\alpha_{AB} = 2.0 \quad \alpha_{BC} = 2.5 \quad \alpha_{CD} = 1.5$

El costo de operación está dado por los siguientes modelos reducidos:

Método I: $C_I = 200\ F/\alpha_I$
Método II: $C_{II} = 250\ F/\alpha_{II}$

donde F es la alimentación total a cada columna y α es la volatilidad relativa.



Coeficientes de distribución para hidrocarburos ligeros. Fuente: Perry, R.H. y C.H. Chilton, *Chemical Engineers' Handbook*, 5a. ed., McGraw-Hill (1973).

Use el método combinado heurístico-evolutivo de Seader y Westerberg y encuentre la secuencia de separación óptima para este sistema.

8.16 Se desea separar una mezcla de cinco componentes ABCDE en sus componentes puros. El flujo a procesar es de 100 mol/h y la composición de la mezcla es

(ABCDE) = (0.3, 0.1, 0.3, 0.2, 0.1)

Se consideran dos opciones:

Opción I:	Destilación ordinaria
Opción II:	Destilación extractiva

Los valores de las volatilidades relativas promedio son:
Propiedad I: $\alpha_{AB} = 2.5$; $\alpha_{BC} = 2.0$; $\alpha_{CD} = 1.8$; $\alpha_{DE} = 1.7$
Propiedad II: $\alpha_{AB} = 2.0$; $\alpha_{BC} = 2.0$; $\alpha_{CD} = 1.5$; $\alpha_{DE} = 1.8$

Los siguientes modelos reducidos pueden emplearse para estimar el costo de operación para cada método de separación:

Opción I:	Costo = 200 F/α_I
Opción II:	Costo = 300 F/α_{II}

donde F es la alimentación a cada columna.

Use el método heurístico-evolutivo de Seader y Westerberg y obtenga la mejor secuencia de separación.

8.17 Aplicando algún método conveniente, encuentre la mejor secuencia de separación para una mezcla con los siguientes flujos de alimentación.

Componente	Flujo, kmol/h	Corte	α_{ij}
A	200	A/B	1.1
B	50	B/C	2.5
C	200	C/D	1.5
D	200	D/E	2.0
E	50	E/F	1.4
F	300		

Los componentes D y E son reactivos que pueden recircularse juntos a uno de los reactores que anteceden al tren de separación.

El costo de separación para cada columna, en \$/año, está dado por

$$Costo = 4\left(\frac{7.8F_{a\,\lim}}{\ln\alpha_{ij}}\right)^{0.8} + 30F_{destilado} + 90F_{fondos}$$

donde todos los flujos están en kmol/h. Reporte la mejor secuencia obtenida y su costo de operación correspondiente.

8.18 Se desea separar una mezcla de tres componentes ABC, donde donde A = n-pentano, B = n-hexano y C = n-heptano. La mezcla original consiste de un flujo de 100 mol/h con una composición molar de (A,B,C) = (0.6, 0.2, 0.2). Se estipulan altas recuperaciones, equivalentes al 98% de los componentes clave. Como servicios auxiliares se dispone de agua de en-

friamiento a 90°F, freón a 20°F, y dos tipos de vapores de calentamiento, uno a 300°F y otro a 400°F.

a) Usando cualquier método aplicable, encuentre la mejor secuencia de separación para esta mezcla. Justifique por qué la secuencia que propone se espera sea la mejor desde un punto de vista económico.
b) Para la primera columna de la secuencia, proponga la presión de diseño. Esta presión deberá tender a un valor óptimo, aunque la precisión numérica pudiera ser aproximada. Justifique por qué esta presión minimiza el costo de operación de la columna.
c) Para la segunda columna, indique si la presión óptima de diseño debe ser mayor, igual o menor que la de la primera columna. No se requieren cálculos numéricos para esta columna. Justifique por qué se indica esa tendencia de la presión óptima.

8.19 Se desea separar una mezcla de cuatro componentes, ABCD, en componentes esencialmente puros. Los flujos de alimentación de cada componente en kgmol/h son (ABCD) = (15, 20, 30, 10). Se consideran tres propiedades de separación, destilación ordinaria, destilación extractiva y extracción líquido-líquido. Las propiedades para cada método son:

Método I (Destilación ordinaria) Orden ABCD

$\alpha_{AB} = 1.03$ $\alpha_{BC} = 1.5$ $\alpha_{CD} = 2.0$

Método II (Destilación extractiva) Orden ABDC

$\alpha_{AB} = 1.8$ $\alpha_{BC} = 1.5$ $\alpha_{DC} = 2.3$

Método III (Extracción líquido-líquido) Orden ABCD

$\alpha_{AB} = 1.7$ $\alpha_{BC} = 1.5$ $\alpha_{CD} = 2.5$

Suponga que los costos de separación anuales para cada método pueden estimarse en forma rápida mediante los siguientes modelos reducidos:

Método I: $$C_{sep} = 500\frac{F}{\alpha}$$

Método II: $$C_{sep} = 1{,}000\frac{F}{\alpha}$$

Método III: $$C_{sep} = 3{,}000\frac{F}{\alpha}$$

donde F es la alimentación a cada columna y α es la volatilidad relativa de cada método de separación que se usa.

Usando el método heurístico-evolutivo de Seader y Westerberg, encuentre la secuencia de separación óptima.

8.20 Se tiene una mezcla de cuatro componentes ABCD que se desea separar en los productos A, BD y C. Se consideran dos propiedades con los valores que se dan en seguida.

	P_I	P_{II}	
A	100	500	Notar el orden de los
B	40	300	componentes para cada
C	20	100	propiedad
D	10	200	

La cantidad de cada componente en la alimentación en mol/hr es ABCD = (50, 40, 50, 10).

Los costos de separación de cada método de separación, en $/año, pueden estimarse mediante los siguientes modelos reducidos:

Propiedad I Propiedad II

$$Costo = 500\frac{F}{\Delta P_I} \qquad Costo = 750\frac{F}{\Delta P_I}$$

donde F es la alimentación total a cada columna y ΔP es la diferencia de propiedad entre componentes clave sobre la cual se basa la separación. Usando programación dinámica, encuentre la secuencia de separación óptima.

8.21 Aplique el método que minimiza flujos para detectar la mejor secuencia de separación al ejemplo basado en la Tabla 8.4. Construya una nueva tabla de programación dinámica para encontrar esa secuencia.

8.22 Obtenga la secuencia que minimiza los flujos de alimentación a las columnas del sistema para los datos del problema de la Tabla 8.7, que sirvió en este capítulo para mostrar el método heurístico-evolutivo. Compare la estructura resultante con la obtenida por el método heurístico-evolutivo.

8.23 Se desea separar una mezcla de cinco componentes ABCDE en los compuestos A, C, BD y E. El flujo original de alimentación es de 1,000 kmol/hr y la fracción mol de la alimentación es (0.2, 0.4, 0.1, 0.1, 0.2).

Se consideran dos propiedades, I (Destilación) y II (Destilación extractiva con fenol). El orden de mayor a menor volatilidad de los componentes para cada propiedad es:

I: ABCDE II: ACBDE

Los valores de volatilidad relativa son:

I: $\alpha_{AB} = 2$ $\alpha_{BC} = 1.7$ $\alpha_{CD} = 1.5$ $\alpha_{DE} = 1.04$
II: $\alpha_{AB} = 2.5$ $\alpha_{CB} = 2$ $\alpha_{BD} = 2$ $\alpha_{DE} = 1.7$ $\alpha_{AC} = 2.4$

Para la estimación de costos de operación, en $/año, pueden usarse los siguientes modelos reducidos:

Método I $$Costo\ anual = 500\frac{F}{\alpha_I}$$

Método II $$Costo\ anual = 600\frac{F}{\alpha_{II}}$$

donde F es el flujo de alimentación total a cada columna en kmol/h y α es la volatilidad relativa.

Escoja algún método de síntesis de sistemas de separación y encuentre la mejor secuencia posible. Indique las bases de selección del método y cualquier otra suposición que haga.

8.24 Considere la siguiente mezcla que se ha generado en un proceso para ser separada.

Componente	Fracción mol
A	0.20
B	0.15
C	0.20
D	0.15
E	0.15
F	0.15

Los productos deseados son A, BD, C, EF. Pueden considerarse los siguientes valores promedio de las volatilidades relativas.

$\alpha_{AB} = 3.50$ $\alpha_{BC} = 1.20$ $\alpha_{CD} = 2.70$
$\alpha_{DE} = 1.21$ $\alpha_{EF} = 3.0$

Use el método de minimización de flujos para detectar la estructura de separación óptima. Asegúrese de que en caso de haber varios esquemas con la misma función objetivo, se pueda elegir una estructura final en base a los criterios completos del método.

8.25 Considere la mezcla especificada en el problema anterior, pero en este caso los productos deseados son los seis componentes puros. Proponga una estructura óptima de acuerdo a alguno de los métodos cubiertos en este capítulo.

8.26 Se desea detectar el mejor esquema de destilación para separar una mezcla ternaria consistente de butano, pentano y hexano usando una presión de diseño de 10 atmósferas. Use los nomogramas de Tedder y Rudd y sugiera el esquema que separa los componentes a un costo mínimo:

a) Para una alimentación (0.4, 0.2, 0.4)
b) Para una alimentación (0.33, 0.33, 0.33)
c) Para una alimentación (0.4, 0.4, 0.2)

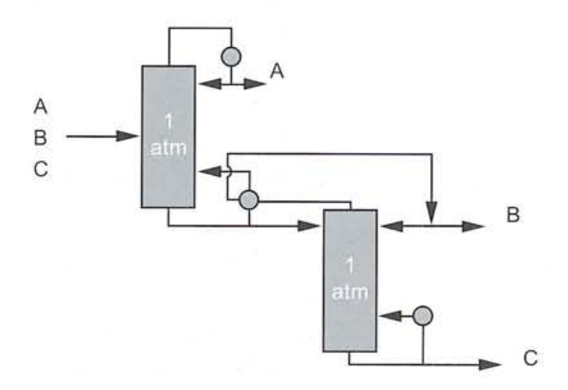
8.27 Detecte el mejor esquema de destilación para la mezcla ternaria hexano, heptano y octano de las ocho opciones analizadas por Tedder y Rudd. Considere que las columnas operan a presión atmosférica. Reporte el esquema recomendado para cada una de las tres posibles alimentaciones que se mencionan en el problema anterior.

8.28 Después de tomar un curso de diseño de procesos, Guillermo aprende que se pueden obtener importantes reducciones en el costo de operación de procesos mediante integración de energía. Se le ocurre entonces una idea: ¿por qué no ahorrar energía en columnas de destilación integrando las cargas térmicas de reboiler y condensador en una secuencia de separación? Sin embargo, al mostrar su diseño a su amigo René, escucha que la idea no funciona puesto que ese intercambio es termodinámicamente imposible. Con objeto de aclarar puntos de vista, busca la opinión de otro

compañero, José, quien opina que la idea podría funcionar dependiendo de los componentes a separar, aunque no siempre es factible. ¿Quién está en lo correcto?

a) Guillermo
b) René
c) José

El diseño:



9

SÍNTESIS DE REDES DE INTERCAMBIADORES DE CALOR

9.1 Formulación del problema
9.2 El concepto de ΔT mínima
9.3 Uso de diagramas de contenido de calor
9.4 El método del punto de pliegue

Los altos costos de energía observados durante la década de los setenta motivaron el desarrollo de procesos con un uso eficiente de energía. El ahorro de servicios ofrece un potencial interesante para mejorar la economía de un proceso. Se ha demostrado en el capítulo anterior, por ejemplo, que el costo de servicios en columnas de destilación representa el componente principal en el costo total anual de esos procesos de separación.

En un proceso químico, se tienen generalmente varias corrientes que requieren de calentamiento y otras que necesitan de enfriamiento. Una práctica común es satisfacer estos requisitos mediante el uso de servicios (vapor y agua de enfriamiento). Avances recientes han desembocado en técnicas para la síntesis de sistemas que aprovechan las características de las corrientes involucradas en el proceso, de tal manera que corrientes calientes y corrientes frías intercambien calor para ahorrar el consumo de servicios. Esto puede requerir un número adicional de intercambiadores de calor; sin embargo, el ahorro en el costo de requerimientos energéticos en la mayoría de los casos compensa en exceso el costo adicional del equipo.

9.1 Formulación del problema

El problema de la síntesis de redes de intercambiadores de calor se puede formular de la siguiente manera. Dadas n corrientes calientes que deben enfriarse y m corrientes frías que requieren calentamiento, el objetivo es encontrar una red de intercambiadores de calor que satisfaga los requerimientos de temperaturas finales a un costo mínimo.

Existe un problema combinatorial que aumenta drásticamente a medida que se considera un mayor número de corrientes. Esto complica la búsqueda de una estructura óptima. Para sintetizar redes de intercambiadores de calor se pueden usar enfoques heurísticos y algorítmicos.

9.2 El concepto de ΔT mínima

El incentivo para el diseño de una red de intercambiadores de calor se basa en el compromiso que se observa entre la inclusión de un intercambiador interno (entre corrientes de proceso) y el ahorro de servicios que se genera. Una variable importante en este diseño es la cantidad de calor que se intercambia en cada unidad.

Considérese, por ejemplo, la siguiente situación. Una corriente caliente debe enfriarse de 180 a 120°F, mientras que una corriente fría debe calentarse de 100 a 180°F. Estos requerimientos de energía pueden satisfacerse mediante un enfriador con agua de enfriamiento y un calentador con vapor, respectivamente. Si se desea un sistema que reduzca el consumo de servicios se puede comenzar por diseñar un intercambiador entre las dos corrientes. Consideremos por un momento la opción de que ambas corrientes se procesaran en forma completa; en el extremo frío del intercambiador se tendría una diferencia de temperaturas entre las corrientes de 20°F, mientras que en el otro extremo se tendría el límite de calentar la corriente fría hasta 180°F con otra que se encuentra a la misma temperatura. El costo de servicios desaparece, pero el diseño de

ese intercambiador implica un área infinita. La solución que deseamos se encuentra entre estos dos extremos.

Lo anterior establece que debe existir una diferencia de temperaturas en el extremo crítico del intercambiador que proporciona el mejor compromiso entre el costo de servicios y el costo del equipo. Este concepto, el de establecer una diferencia mínima de temperaturas entre corrientes que intercambian calor (ΔT_{min}), es esencial para el diseño de cualquier red de intercambiadores de calor. Es muy común tomar, en forma heurística, un valor de ΔT_{min} de 10 a 20°F.

9.3 USO DE DIAGRAMAS DE CONTENIDO DE CALOR

Rudd et al. propusieron el uso de diagramas de contenido de calor como ayuda en la asignación de los intercambios que generan una red de recuperación de energía. Aunque el enfoque es heurístico y no garantiza por lo tanto una solución óptima, proporciona una manera bastante clara de entender la lógica para una buena solución del problema.

El método consiste en graficar el contenido de calor de cada corriente en ejes de WC_p contra ΔT; el área de cada bloque representa la cantidad de energía que esa corriente tiene disponible (para corrientes calientes) o que necesita (para corrientes frías). Se sugiere proponer intercambios de calor de acuerdo a la siguiente regla heurística:

Preservando un valor adecuado de ΔT_{min}, proponer el primer intercambio entre la corriente más caliente a enfriarse y la parte más caliente de cualquier corriente fría a calentarse. Preservar ese orden en los siguientes intercambios hasta donde sea posible.

El método se ilustra con el problema mostrado en la Tabla 9.1. Se tienen dos corrientes calientes y dos corrientes frías. Si se usan solamente servicios para satisfacer las necesidades térmicas de las corrientes, el costo de operación del sistema se calcula como 98,116 $/año, del cual el 98 por ciento (96,025 $/año) es debido a servicios (el lector puede fácilmente corroborar estos cálculos). El incentivo existe para sintetizar una red de intercambiadores de calor que reduzca el costo de servicios, y por lo tanto el costo anual del proceso del cual esas corrientes forman parte.

La Figura 9.1 muestra el diagrama de contenido de calor de las corrientes. Lo primero que debe corroborarse son los límites de temperatura que termodinámicamente se pueden lograr mediante integración de energía. Suponiendo una ΔT mínima de 20°F y teniendo la corriente más caliente a 480°F, lo más que se puede calentar cualquier corriente fría es a 460°F. La corriente c_2 necesita entonces un servicio externo de calentamiento para llegar a su temperatura final de 500°F. Por otro lado, teniendo la corriente más fría a 140°F no existe restricción termodinámica para enfriar la corriente h_1 hasta 200°F. Usando la segunda regla heurística, se propone un intercambio entre h_2 y c_2; la corriente c_2 puede pasar de 240 hasta 460°F, mientras que la temperatura a la que h_2 sale del intercambiador es de 353°F.

La corriente c_1 intercambia calor con la fuente más caliente disponible para lograr su temperatura final de 320°F. Usando h_2 para este fin, se tiene que c_1 debe entrar al intercambiador a 219°F, lo cual satisface la necesidad de enfriamiento de h_2. Finalmente, se hace el intercambio entre c_1 y h_1, con el cual c_1 se calienta de 140 a 219°F, y h_1 sale del intercambiador a 252°F. El resto de

Tabla 9.1

Datos de las corrientes y de diseño

Corriente	WC_p, Btu/hr °F	Temperatura de entrada, °F	Temperatura de salida, °F
c_1	1.445×10^4	140	320
c_2	1.153×10^4	240	500
h_1	1.667×10^4	320	200
h_2	2.000×10^4	480	280

Diseño

Presión de vapor (saturado)	962.5 lb/in^2
Temperatura del agua de enfriamiento	100°F
Temperatura máxima de salida del agua	180°F
Diferencia mínima de temperatura Intercambiadores de calor Calentadores Enfriadores	 20°F 25°F 20°F
Coeficientes globales de transferencia de calor Intercambiadores de calor Calentadores Enfriadores	 150 Btu/hr ft^2 °F 200 Btu/hr ft^2 °F 150 Btu/hr ft^2 °F
Paro de equipo	380 hr/año
Parámetros de costo de intercambiadores de calor	Costo = a A^b ; a = 350; b = 0.6 A en ft^2
Factor de depreciación	0.1
Costo de agua de enfriamiento	5×10^{-5} \$/lb
Costo de vapor	1×10^{-3} \$/lb

energía disponible en h_1 debe procesarse con agua de enfriamiento. La asignación de intercambios se muestra en la Figura 9.2. Nótese que ΔT mínima debe comprobarse cuidadosamente en cada intercambio.

La red de intercambiadores de calor obtenida se presenta en la Figura 9.3. La evaluación económica de esta red se resume en la Tabla 9.2. El costo de operación de la red es de 16,304 $/año, lo cual representa una reducción superior al 80 por ciento.

9.4 El método del punto de pliegue

Describiremos ahora un método para la síntesis de redes de intercambiadores de calor que ha sido objeto de especial interés en esta área. El método se basa en detectar, bajo principios termodinámicos, un punto muy crítico para el diseño



FIGURA 9.1
Diagrama de contenido de calor.

de la red llamado el punto de pliegue (o punto de pinzamiento). Para ilustrar el método, se usan los datos del problema mostrado en la Tabla 9.3, el cual consiste de dos corrientes calientes y dos corrientes frías.

Comenzamos por ajustar las temperaturas de las corrientes calientes restando a cada una de ellas el valor del ΔT mínimo especificado. Suponiendo un ΔT mínimo de 20°F, se obtienen los ajustes que se muestran en la Tabla 9.4. Nótese que las temperaturas de las corrientes frías permanecen inalteradas. Con referencia a las temperaturas ajustadas, se establece el orden decreciente que se muestra en la tabla (los valores duplicados no se toman en cuenta). A partir de las cinco temperaturas modificadas que se han obtenido, se definen cuatro inter-

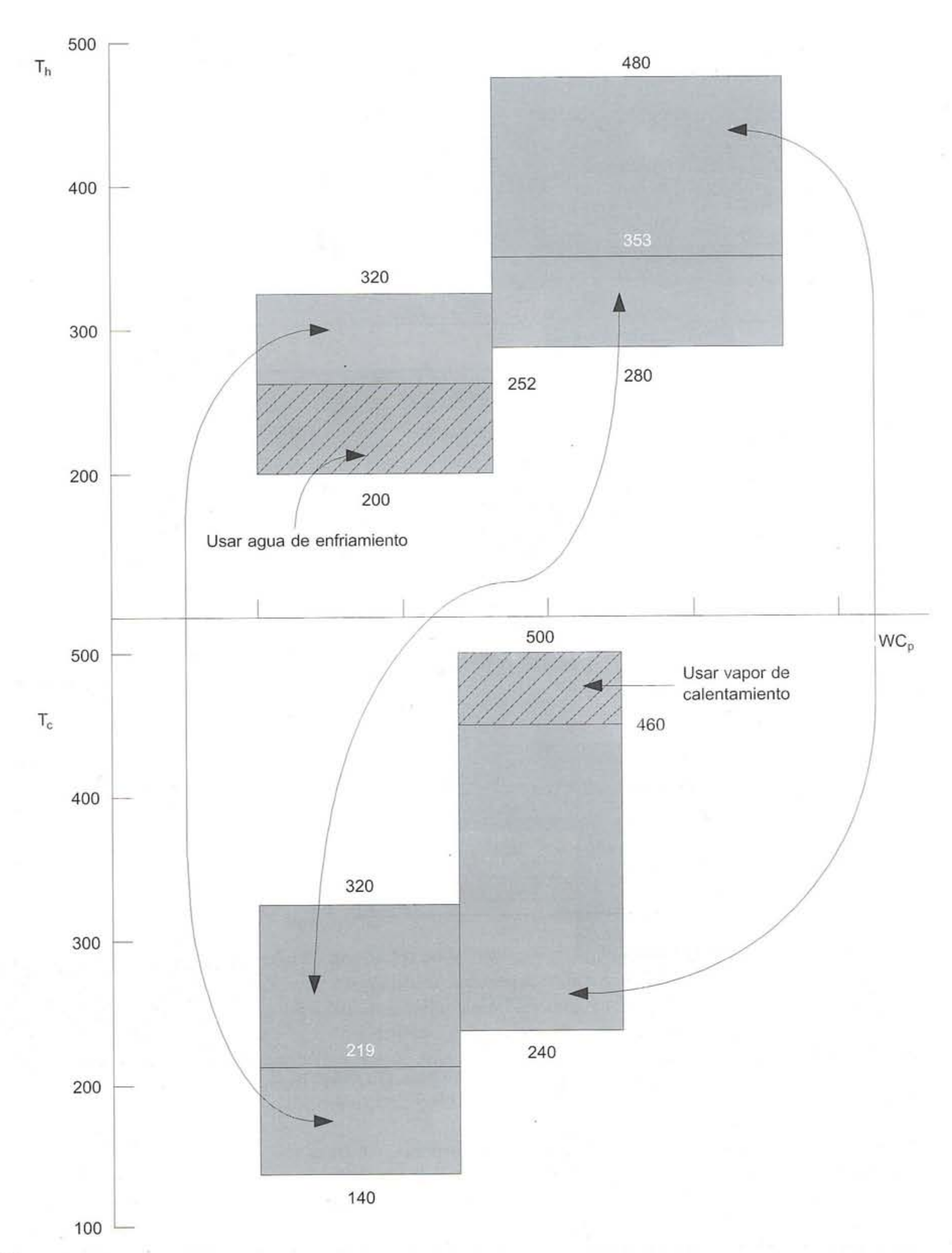


FIGURA 9.2
Asignación de intercambio de calor entre las corrientes.

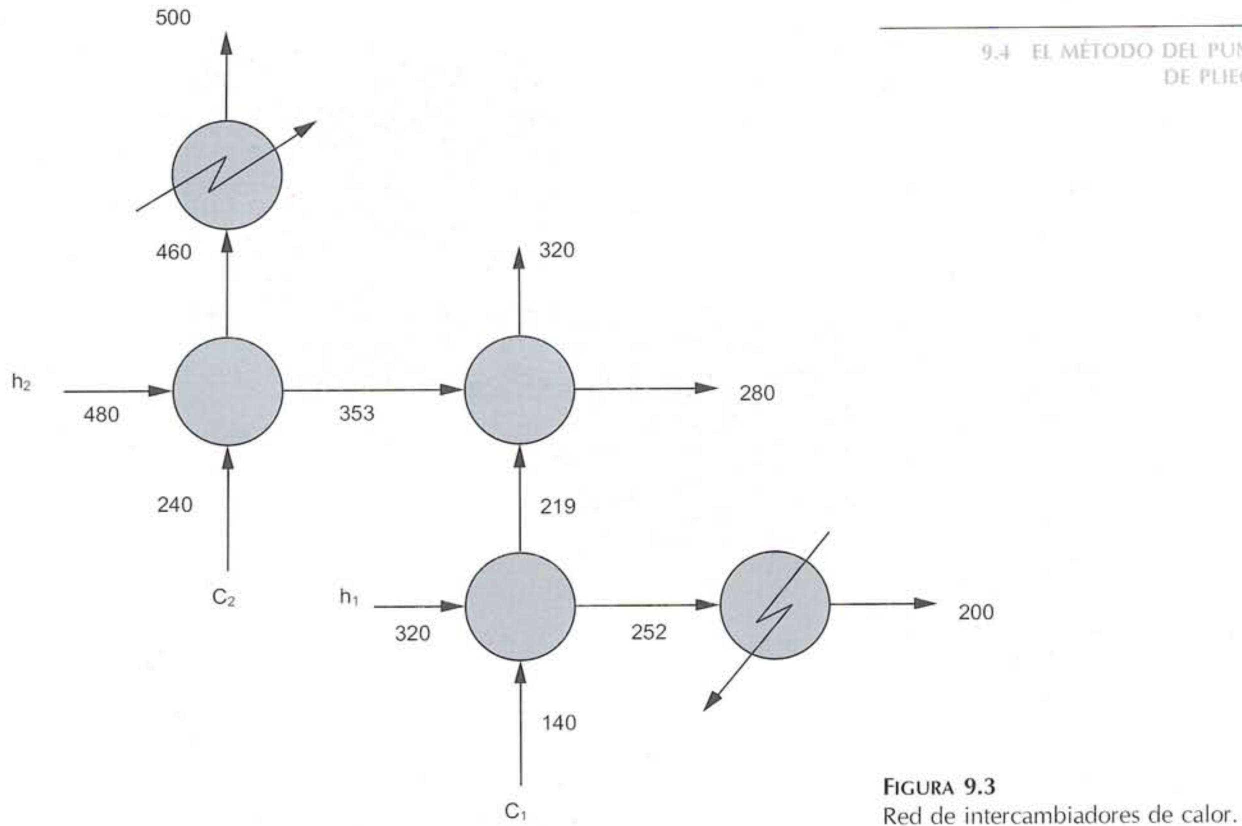


FIGURA 9.3
Red de intercambiadores de calor.

Costo de operación = 16,304 \$/año

Tabla 9.2 Análisis económico de la red de intercambiadores de calor					
Intercambiador	Area, ft^2	Costo	Vapor, lb/año	Agua, lb/año	Costo de servicios, \$/año
1	315	11,042	--	--	--
2	214	8,756	--	--	--
3	29	2,619	--	--	--
Enfriador	92	5.276	--	1.467x10^8	7,333
Calentador	40	3,200	5.88x10^6	--	5,880
		C_E=30,913			C_S=13,213
Costo de operación = C_F + C_S/10 = 16,304 \$/año					

Tabla 9.3 Datos del problema			
Corriente	T entrada, °F	T salida, °F	Wc_p, Btu/hr °F
1	250	100	0.95×10^4
2	180	100	0.84×10^4
3	110	200	1.00×10^4
4	110	230	0.90×10^4

Tabla 9.4 Temperaturas modificadas			
Corriente	T original	T ajustada	Orden
1	250	230	T_1
	100	80	T_5
2	180	160	T_3
	100	80	Duplicada
3	110	110	T_4
	200	200	T_2
4	110	110	Duplicada
	230	230	Duplicada

valos de temperatura, y para cada uno de ellos se efectúa un balance de entalpía. Para cualquier intervalo i el balance de entalpía está dado por:

$$\Delta H_i = (\Sigma WC_{p\ cal} - \Sigma WC_{p\ frías})\ (T_i - T_{i+1})$$

Los balances para cada intervalo se muestran en la Tabla 9.5. La idea ahora es formar una cascada de calor que vaya desde T_1 hasta T_5; si suponemos inicialmente que no hay una fuente de calor externa ($Q_h = Q_1 = 0$), podemos evaluar la cantidad de calor que fluye desde un nivel de temperatura T_i hasta un nivel T_{i+1} mediante el siguiente balance:

$$Q_{i+1} = Q_i + \Delta H_i$$

La cascada de calor resultante se muestra en la Figura 9.4. Observamos que se obtienen valores negativos para algunos niveles (Q_2 y Q_3); esto implica que la cascada de calor viola la segunda ley de la termodinámica ya que signifi-

Tabla 9.5 Balances de entalpía	
$\Delta H_i = \left(\Sigma WC_{p,\ cal} - \Sigma WC_{p,\ frios}\right)\left(T_i - T_{i+1}\right)$	
$\Delta H_1 = (230 - 200)\ (0.95 - 0.9)$	$= 1.5 \times 10^4$
$\Delta H_2 = (200 - 160)\ (0.95 - 1.0 - 0.9)$	$= -38 \times 10^4$
$\Delta H_3 = (160 - 110)\ (0.95 + 0.84 - 1.0 - 0.9)$	$= -5.5 \times 10^4$
$\Delta H_4 = (110 - 80)\ (0.95 + 0.84)$	$= 53.7 \times 10^4$

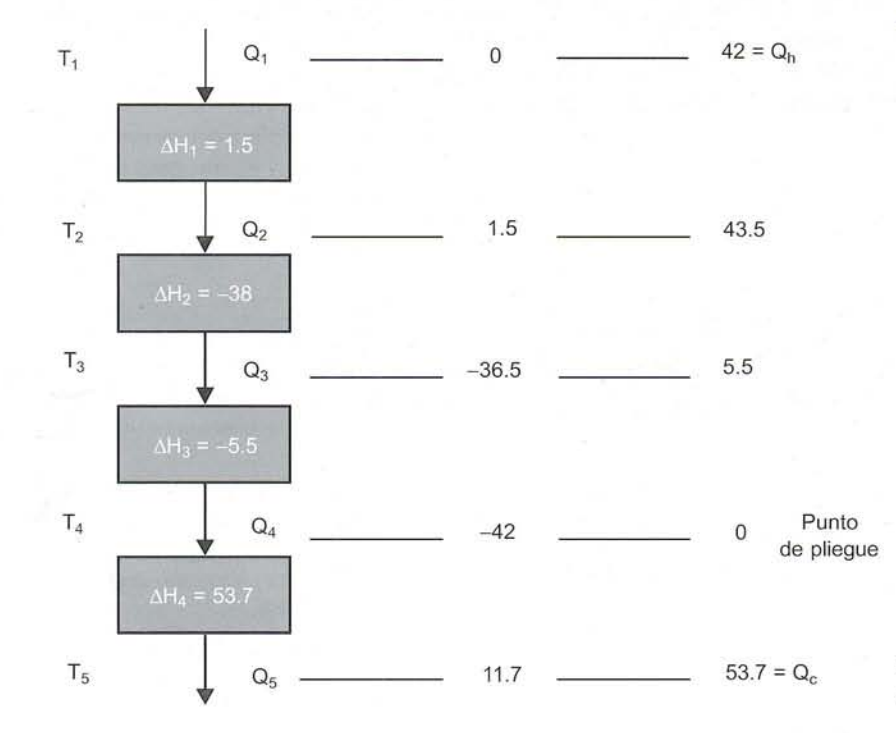


FIGURA 9.4
Cascada de calor.

caría que se estaría transfiriendo calor de una región de baja temperatura a otra de alta temperatura. Para corregir este efecto, necesitamos agregar calor de alguna fuente externa; se elige entonces el valor negativo más alto y se agrega esa cantidad como Q_h. El esquema resultante debe cumplir ahora con el flujo natural de calor, es decir Q_i debe ser mayor o igual a cero para toda i. De los balances de energía para cada intervalo, obtenemos los valores mostrados en la Figura 9.4. De este análisis se desprenden tres puntos importantes para el diseño de redes de intercambiadores de calor:

a) Q_h representa la cantidad mínima de calentamiento que se necesita por parte de servicios externos.
b) Q_c representa la cantidad mínima de enfriamiento.
c) Notamos que el flujo de calor Q_4 es igual a cero. Esto proporciona un punto crítico para el diseño de la red que llamaremos el *punto de pliegue*.

Para el problema en cuestión,

a) Cantidad mínima de calentamiento: 42×10^4 Btu/hr
b) Cantidad mínima de enfriamiento: 53.7×10^4 Btu/hr
c) Punto de pliegue: 110°F (temperaturas modificadas)

Por lo tanto, con respecto a las temperaturas originales, el punto de pliegue para las corrientes calientes es de 130°F, y para las corrientes frías es de 110°F.

El objetivo ahora es el de diseñar una red de intercambiadores de calor que cumpla con los requerimientos mínimos de servicios que se han estimado.

El punto de pliegue divide a la red en dos zonas, y los siguientes criterios son esenciales para obtener la red que se busca:

a) *No transferir calor a través del punto de pliegue*
Cualquier cantidad de calor que se transfiera debe satisfacer un balance global de energía, lo cual implica que el consumo de servicios va a exceder a los requerimientos mínimos, tanto de calentamiento como de enfriamiento, en una cantidad equivalente a la que se transfiere a través del punto de pliegue.

b) *No usar calentamiento abajo del punto de pliegue*
Cualquier cantidad que se use en este nivel debe rechazarse eventualmente a una fuente de enfriamiento externa, alterando así el consumo de servicios con respecto a los requerimientos mínimos.

c) *No usar enfriamiento arriba del punto de pliegue*
Cualquier cantidad de enfriamiento que se use arriba del punto de pliegue debe compensarse con una cantidad equivalente de calentamiento.

Para aplicar el método conviene usar la representación de rejilla que se muestra en la Figura 9.5 para indicar un intercambio de calor entre dos corrientes.

El número mínimo de unidades que se requieren para cada lado de la red puede estimarse mediante:

$$U_{mín} = N_c + N_s - 1$$

donde $U_{mín}$ es el número mínimo de intercambiadores, N_c es el número de corrientes involucradas y N_s es el número de servicios. Esta ecuación supone que en cada intercambio una de las corrientes se agota completamente, y la otra queda disponible para algún intercambio posterior.

La representación inicial para el problema numérico se da en la Figura 9.6. Se ha dividido el problema en dos regiones con respecto al punto de pliegue con el fin de preservar la transferencia de calor a través de él. De acuerdo a los criterios establecidos para el diseño de la red, la región de arriba del punto de

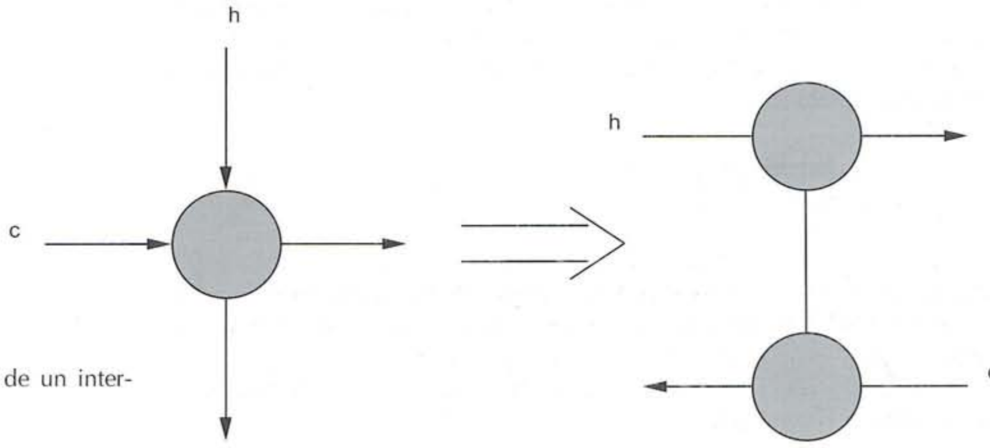


FIGURA 9.5
Representación de rejilla de un intercambiador de calor.

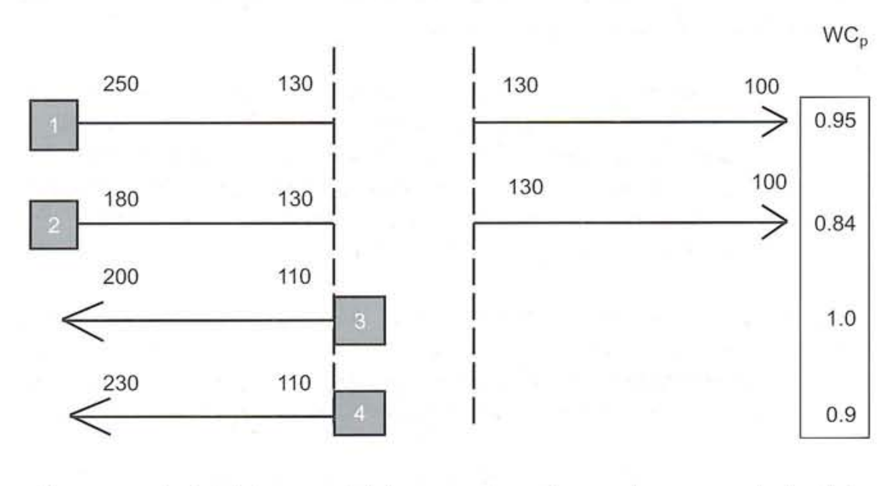


FIGURA 9.6
Corrientes del problema de diseño ubicadas con respecto al punto de pliegue.

pliegue consistirá de intercambiadores y calentadores, mientras que la de abajo incluirá intercambiadores y enfriadores. Para la zona de arriba del punto de pliegue, o zona de calentamiento, el número mínimo de unidades es cuatro (4 corrientes + 1 servicio – 1). Nótese que no se incluye el servicio de enfriamiento en esta zona. En la zona de abajo del punto de pliegue o de enfriamiento, el número mínimo de unidades es de 2. A continuación procederemos con el diseño de la red.

Por debajo del punto de pliegue

Tenemos dos corrientes calientes únicamente, por lo tanto usamos servicios de enfriamiento. La carga térmica de cada enfriador es de 28.5×10^4 y de 25.2×10^4 Btu/hr respectivamente, lo cual cumple con el consumo mínimo de enfriamiento de 53.7×10^4 Btu/hr.

Por encima del punto de pliegue

Aquí tenemos dos corrientes calientes y dos corrientes frías. El diseño de la red debe comenzar en el punto de pliegue, debido a que este es el punto más restringido de la red. En este nivel, tenemos que la ΔT mínima se cumple para uno de los extremos del intercambiador; para la región que estamos analizando, se cumple para el lado frío de un intercambiador a contracorriente. Tenemos dos posibilidades para comenzar el diseño de la red, combinar 1 con 4 y 2 con 3, o combinar 1 con 3 y 2 con 4. Para elegir el intercambio adecuado se debe cumplir el siguiente criterio:

$$WC_{p\ \text{fría}} \geq WC_{p\ \text{caliente}}$$

lo cual se desprende de un balance de energía para un intercambiador a contracorriente para el cual se tiene una diferencia igual a ΔT mínima en su lado frío. De otra manera, el intercambio propuesto no sería viable ya que violaría la ΔT mínima especificada en el otro extremo del intercambiador. Notar que esta regla se invierte para identificar los intercambios factibles inmediatamente por debajo del punto de pliegue.

Resulta claro entonces que los intercambios iniciales deben ser entre 1 y 3 y entre 2 y 4. Haciendo estos intercambios, se satisfacen los requerimientos energéticos de la corriente 2 y de la corriente 3. Intercambiando ahora la corriente 1 con la corriente 4 (este intercambio es ahora factible debido a que la diferencia de temperaturas del lado frío del intercambiador es mayor que ΔT_{min}), se obtiene que la corriente 1 satisface sus requerimientos energéticos, mientras que la corriente 4 se calienta hasta 184°F (su temperatura final debe ser de 230°F). Como ya no existen corrientes calientes disponibles, ajustamos la temperatura de la corriente 4 hasta su nivel final mediante el uso de servicios de calentamiento. La cantidad de calentamiento requerida es de 42×10^4 Btu/hr, lo cual coincide con la cantidad mínima que se había estimado al hacer los balances de energía entre los intervalos de temperatura modificados. La red resultante se muestra en la Figura 9.7. El número de unidades que se requieren en la red es de 6, lo cual satisface también el número mínimo requerido.

El método del punto de pliegue no garantiza un óptimo global al problema original, es decir, la red resultante no necesariamente es la más económica. Sin embargo, dado que el costo anual de servicios es significativamente más alto que el costo amortizado del equipo, la red resultante representa por lo general una excelente alternativa desde el punto de vista económico.

En contraste al problema que acabamos de mostrar, donde dos corrientes calientes intercambiaron calor con dos corrientes frías por encima del punto de

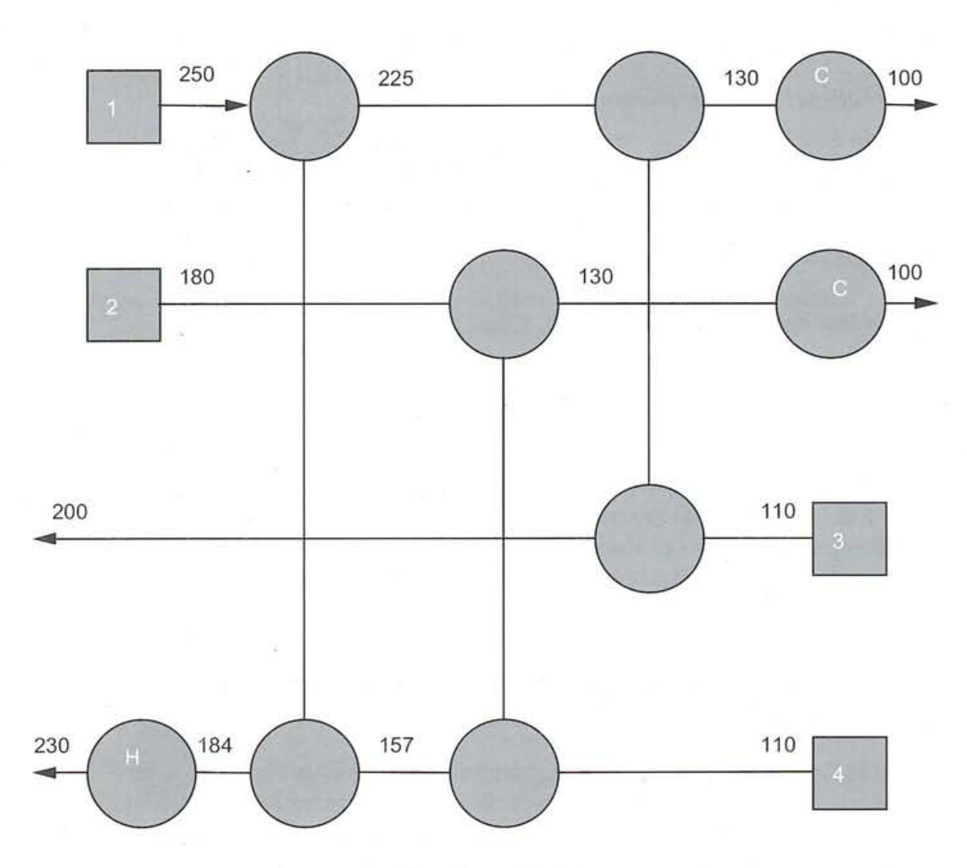


FIGURA 9.7
Corrientes del problema de diseño ubicadas con respecto al punto de pliegue.

pliegue, existen casos en los cuales los intercambios de calor entre las corrientes originales del proceso parecen no garantizar el objetivo de generar una red con el consumo mínimo de servicio. El siguiente ejemplo ilustra esta situación.

Ejemplo 9.1

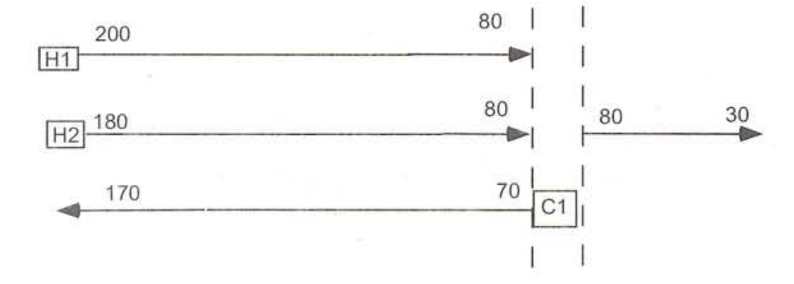
Se quieren usar dos corrientes calientes y una corriente fría para diseñar una red de intercambiadores de calor. La siguiente tabla proporciona los datos del problema.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	W Cp, kcal/h °C
H1	200	80	2
H2	180	30	7
C1	70	170	10

Considerando un valor de ΔT_{min} de 10°C, use el método del punto de pliegue para integrar la máxima cantidad de calor entre las corrientes.

Solución

Desarrollando una cascada de calor al valor proporcionado de ΔT_{min}, se obtiene que la carga mínima de calentamiento es de 60 kcal/h, la carga mínima de enfriamiento es de 350 kcal/h, y que el punto de pliegue es de 80°C para las corrientes calientes y 70°C para las corrientes frías. El siguiente diagrama proporciona la estructura de las corrientes con respecto al punto de pliegue.



El diseño de la red se descompone en las dos secciones del punto de pliegue.

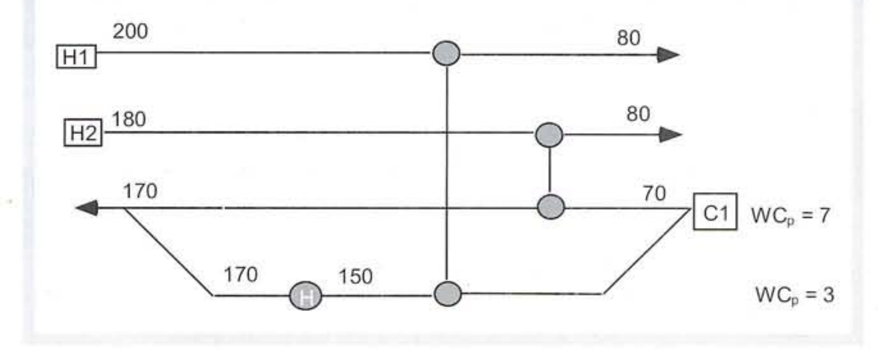
Abajo del punto de pliegue

Existe sólo una corriente caliente, por lo que la única opción es el uso de agua de enfriamiento. La carga térmica del enfriador es de 350 kcal/h, lo cual coincide con el resultado de la cascada de calor.

Arriba del punto de pliegue

Se tienen dos corrientes calientes y una corriente fría. Dada la relación de los WCps, cualquier intercambio es factible. Sin embargo, consideremos el efecto de efectuar cualquier intercambio directamente. Supongamos por ejemplo que se usa la corriente H1 para intercambiar calor con C1. Cualquier cantidad de calor que se intercambie ocasionará que la corriente C1 tenga una temperatura de salida mayor que 70°C. Bajo estas condiciones, ya no será posible llevar la otra corriente caliente H2 hasta su valor terminal de 80°C. ¡En general, cualquier cantidad de calor que se use para integrar directamente C1 con H1 es energía que se pierde para la integración de la corriente H2! Recordemos que arriba del punto de pliegue toda la energía de las corrientes calientes es integrable. Esto implica que termodinámicamente H1 y H2 son integrables en esta sección de la red de manera completa.

La solución a este conflicto consiste en implementar una división de corriente para C1. Cada rama de la divisón debe preservar el criterio respectivo de los WCps para que cada intercambio sea factible. Existen varias opciones válidas. Una de ellas se muestra en la siguiente figura, y consiste de una rama de C1 con WCp igual al de H2, y el resto se usa para intercambiar calor con H1. Este último intercambio ocasiona una temperatura de salida de C1 de 150°C, y es necesario un calentador para llevarla a su temperatura final de 170°C. La carga térmica del calentador es de 60 kcal/h, como se predijo con la cascada de calor.



Una consecuencia de los principios fundamentales del método es que la división de corrientes en casos como el anterior siempre existe, lo cual asegura que se pueden estipular intercambios factibles. En otras palabras y en términos generales, siempre existe alguna red factible que puede reflejar los consumos mínimos de energía predichos por la cascada de calor.

Para generalizar el efecto observado en el problema anterior, se pueden establecer los siguientes principios como estrategias necesarias para generar redes de intercambiadores de calor con un consumo mínimo de servicios.

Si inmediatamente arriba del punto de pliegue, el número de corrientes calientes es mayor que el número de corrientes frías, se requiere división de corrientes por parte de las corrientes frías.

Notar que si el número de corrientes frías es mayor que el número de corrientes calientes, no necesariamente se necesita dividir corrientes porque la

energía de las corrientes calientes es integrable en forma completa arriba del punto de pliegue.

Similarmente, puede establecerse que:

Si el número de corrientes frías es mayor que el número de corrientes calientes inmediatamente abajo del punto de pliegue, entonces se requiere división de corrientes por parte de las corrientes calientes.

Referencias

El uso de diagramas de contenido de calor se presenta en

Rudd, D.F., G.J. Powers y J.J. Siirola, *Process Synthesis*, Prentice Hall (1973).

Los primeros trabajos sobre el método del punto de pliegue fueron los siguientes:

Linnhoff, B. y J.A. Turner, "Heat Recovery Networks: New Insights Yield Big Savings", *Chemical Engineering*, 56 (Nov. 2, 1981).

Umeda, T., J. Itoh y K. Shiroko, "Heat Exchange System Synthesis", *Chemical Engineering Progress*, 74, 7, 70 (1978).

Hohmann, E.C., "Optimum Networks for Heat Exchange", Tesis Doctoral, University of Southern California, L.A. (1971).

Linnhoff, B. y Hindmarsh, "The Pinch Design Method for Heat Exchanger Networks", *Chemical Engineering Science*, 38, 5, 745 (1983).

PROBLEMAS

9.1 Lee, Masso y Rudd (*Ind. and Eng. Chem. Fund.*, 9, 48, 1970) usaron el método de Branch y Bound para generar redes óptimas de intercambiadores de calor.

Resuelva los problemas 5SP1 y 6SP1 mostrados abajo usando el método del diagrama de contenido de calor. Compare sus resultados con los óptimos reportados por Lee et al. de 38,278 $/año (para el problema 5SP1) y 35,108 $/año (para el problema 6SP1).

Problema 5SP1

Corriente	Flujo, lb/hr	T_{ent}, °F	T_{sal}, °F	C_P, Btu/lb°F
1	27,000	100	400	0.80
2	42,000	480	250	0.75
3	35,000	150	360	0.70
4	36,000	400	150	0.70
5	38,000	200	400	0.65

Problema 6SP1

Corriente	Flujo, lb/hr	T_{ent}, °F	T_{sal}, °F	C_P, Btu/lb°F
1	20,000	100	430	0.80
2	40,000	440	150	0.70
3	36,000	180	350	0.91
4	35,000	520	300	0.68
5	31,000	200	400	0.85
6	42,000	390	150	0.80

Datos de diseño

Presión de vapor	450 psia
Temperatura de agua de enfriamiento	100°F
Temperatura máxima de salida del agua de enfriamiento	180°F

Diferencias mínimas de temperatura

Intercambiadores de calor	20°F
Calentadores	25°F
Enfriadores	20°F

Coeficientes globales de transferencia de calor

Intercambiadores de calor	150 Btu/hr ft^2 °F
Calentadores	200 Btu/hr ft^2 °F
Enfriadores	150 Btu/hr ft^2 °F
Tiempo de reparación del equipo	380 hr/año
Costo de intercambiadores	350 $A^{0.6}$ (A en ft^2)
Costo de agua de enfriamiento	5×10^{-5} \$/lb

9.2 Considere las siguientes corrientes:

Corriente	T_{ent}, °F	T_{sal}, °F	WC_P, Btu/hr°F
1	600	500	80
(condensa a 500°F; $W\lambda$ = 114 000 Btu/hr)			
2	450	590	110
3	300	400	50

ΔT mínima = 10°F

Use el método heurístico basado en el diagrama de contenido de calor para encontrar una red de intercambiadores de calor que maximice la recuperación de energía.

9.3 Considérese la siguiente tabla de datos:

Corriente	WC_P, Btu/hr°F	T_{ent}, °F	T_{sal}, °F
C_1	1.445×10^4	140	320
C_2	1.153×10^4	240	420
C_3	1.600×10^4	100	430
C_4	3.276×10^4	180	350
h_1	1.667×10^4	320	200
h_2	2.000×10^4	480	280
h_3	2.800×10^4	440	150

Vapor disponible (saturado): 450 lb/in^2

a) Obtenga una red de intercambiadores de calor usando diagramas de contenido de calor. Compare los costos con el caso de usar sólo servicios.
b) Obtenga una red usando el método del punto de pliegue.
c) Comente los resultados obtenidos por ambos métodos.

9.4 Dos corrientes necesitan enfriarse y dos calentarse de acuerdo con la siguiente tabla:

Corriente	Temperatura, °F T_{ent}	T_{sal}	Flujo, lb/hr	Capacidad Calorífica, Btu/lb°F
1	250	100	9,500	1.0
2	180	100	12,000	0.7
3	110	200	10,000	1.0
4	110	230	10,000	0.9

$$\Delta T_{min} = 20°F$$

Use el método del punto de pliegue y obtenga:

a) Los requerimientos mínimos de servicios.
b) El punto de pliegue para las corrientes calientes y frías.
c) El número mínimo de unidades para este problema.
d) La red de intercambiadores de calor que consume el mínimo requerimiento de servicios. Especifique claramente temperaturas de los intercambiadores y cargas térmicas de calentadores y enfriadores.

9.5 Considere el siguiente problema:

Corriente	T_{ent}, °C	T_{sal}, °C	WC_P, kcal/hr°C
1	90	50	6
2	50	20	9
3	20	200	12
4	20	90	10

$$\Delta T \text{ mínima} = 10°C$$

Usando el método del punto de pliegue, obtenga:

a) El punto de pliegue para cada tipo de corrientes.
b) Los requerimientos mínimos de servicios.
c) Una red de intercambiadores de calor que consuma la cantidad mínima de servicios.

9.6 Considere las siguientes corrientes de proceso:

Corriente	T_{ent}, °C	T_{sal}, °C	WC_p, kcal/hr°C
h_1	100	60	4
h_2	140	25	6
c_1	20	180	8

Suponiendo una $\Delta T_{mín} = 10°C$, use el método del punto de pliegue para diseñar una red de intercambiadores de calor. Reporte los siguientes puntos:

a) Los requerimientos mínimos de servicios.
b) El punto de pliegue para corrientes calientes y frías.
c) El número mínimo de unidades para la red.
d) La red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios.

9.7 Considere los siguientes datos:

Corriente	T_{ent}, °C	T_{sal}, °C	WC_P, kcal/hr°C
h_1	170	100	5
h_2	80	20	10
c_1	30	220	6
c_2	20	70	3

Suponiendo un valor de $\Delta T_{mín} = 10°C$, use el método del punto de pliegue y reporte lo siguiente:

a) El consumo mínimo de servicios.
b) El punto de pliegue para las corrientes calientes y para las corrientes frías.
c) El diseño de una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios.

9.8 Considere las siguientes corrientes

Corriente	$WC_P \times 10^{-4}$, Btu/hr °F	T_{ent}, °F	T_{sal}, °F
h_1	10	150	70
h_2	4	220	150
c_1	5	80	270
c_2	3	50	120

Tomando $\Delta T_{mín}$ igual a 20°F, identifique el punto de pliegue y los requerimientos mínimos de servicios. Diseñe una red de intercambiadores que cumpla con esos requerimientos mínimos.

9.9 Se tienen dos corrientes calientes y dos corrientes frías que necesitan procesamiento, de acuerdo a la información proporcionada en la siguiente tabla.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WC_P, kcal/h°C
h_1	175	50	10
h_2	120	65	40
c_1	20	165	20
c_2	40	120	15

Usando un valor de $\Delta T_{mín}$ de 10°C:

a) Estime los requerimientos mínimos de servicios.
b) Reporte el punto de pliegue para cada tipo de corriente.
c) Diseñe una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios.

9.10 Para las corrientes que se especifican en seguida, se ha detectado que para un valor de $\Delta T_{mín}$ de 10°F, el punto de pliegue para las corrientes calientes es de 140°F.

Corriente	T ent, °F	T sal, °F	$WC_P \times 10^{-3}$, Btu/hr°F
1	250	120	2
2	200	100	8
3	130	190	12

a) Diseñe una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios. Indique cuáles son esas cantidades mínimas de calentamiento y de enfriamiento.
b) Justifique por qué la red diseñada consume la mínima cantidad de servicios.

9.11 Considere los siguientes datos para tres corrientes que desean usarse para integrar energía entre ellas.

Corriente	$T_{entrada}$, °F	T_{salida}, °F	WC_p Btu/hr °F
1	200	100	de 200 a 150 °F: 1×10^4 de 150 a 100 °F: 2×10^4
2	180	100	0.5×10^4
3	50	150	4.0×10^4

a) Identifique el punto de pliegue suponiendo una $\Delta T_{mín}$ de 10°F. Reporte el valor para cada tipo de corriente.
b) Indique cuál es la cantidad mínima de servicios que requiere cualquier red de intercambiadores de calor.
(c) Diseñe una red de intercambiadores, que consuma la mínima cantidad de servicios.

9.12 Considere las siguientes corrientes de proceso:

Corriente	T_{ent}, °F	T_{sal}, °F	WC_p, 10^4 Btu/hr °F
1	250	100	1.0
2	200	100	0.9
3	110	180	0.8
4	80	200	0.7
5	80	160	0.6

a) Suponiendo una ΔT_{min} de 20°F encuentre los requerimientos mínimos de servicios para una red de intercambiadores de calor, así como el punto de pliegue para las corrientes calientes y para las corrientes frías.
b) ¿Cuál es el número mínimo de unidades para la red?
c) Diseñe una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios y, de ser posible, que utilice el mínimo número de unidades.

9.13 Se tienen las siguientes corrientes en un proceso, las cuales requieren de cambios energéticos de acuerdo a la información proporcionada en la tabla.

Corriente	T_{ent}, °C	T_{sal}, °C	WC_p, kcal/hr °C
h_1	130	40	8
h_2	120	30	4
h_3	130	50	6
c_1	30	120	10
c_2	30	200	7

Si se usa una $\Delta T_{mín}$ de 10°C, utilice el método del punto de pliegue para diseñar una red de intercambiadores de calor. Reporte lo siguiente:

a) Los requerimientos mínimos de servicios y el punto de pliegue para las corrientes calientes y para las corrientes frías.
b) Una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios. Use la representación de rejilla para presentar su red y reporte claramente las temperaturas de cada intercambiador y las cargas térmicas de calentadores y enfriadores.

9.14 Considere tres corrientes que quieren usarse para diseñar una red de intercambiadores de calor.

Corriente	Flujo, lb/h	T_{ent}, °F	T_{sal}, °F	C_p Btu/lb °F
h_1	1,200	250	200	0.3
		cambia de fase a 200°F, con un calor latente de 1,000 Btu/lb		
		200	150	1.0
c_1	10,000	130	220	0.9
c_2	20,000	130	220	0.8

Usando una ΔT_{min} de 20°F, se ha encontrado que el punto de pliegue es de 180°F para las corrientes frías.

a) Diseñe una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios.
b) Justifique el hecho de que la red obtenida consume exactamente la mínima cantidad de servicios.

9.15 Considere tres corrientes que quieren usarse para diseñar una red de intercambiadores de calor.

Corriente	Flujo, lb/hr	T_{ent}, °F	T_{sal}, °F	C_p Btu/lb °F
h_1	1,200	250	220	0.3
		cambia de fase a 220°F, con un calor latente de 1,000 Btu/lb		
		220	170	1.0
c_1	1,000	150	200	0.9
		cambia de fase a 200°C, con un calor latente de 900 Btu/lb		
		200	240	0.3
c_2	5,000	150	240	0.8

Usando una ΔT_{min} de 20°F, se ha encontrado que el punto de pliegue es de 200°F para las corrientes frías.

a) Diseñe una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios.
b) Justifique por qué la red obtenida consume exactamente la mínima cantidad de servicios.

9.16 Se tienen cinco corrientes de proceso entre las cuales se desea diseñar una red de intercambiadores de calor. Las especificaciones de las corrientes son las siguientes:

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kcal/hr °C
h_1	90	20	8
h_2	70	20	10
c_1	10	60	5
c_2	10	80	8
c_3	10	100	4

Suponiendo una ΔT_{min} de 10°C, aplique el método del punto de pliegue y reporte:

a) Los requerimientos mínimos de servicios.
b) El punto de pliegue para las corrientes calientes y frías.
c) El número mínimo de unidades que se requieren.
d) Una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios, usando el menor número de equipos posible.
e) ¿Es compatible el número de equipos que se predijo en (c) con el que se usó en (d)? Explique la concordancia o la discrepancia entre ambos resultados.

9.17 Las siguientes corrientes son parte de un proceso petroquímico.

Corriente	T ent., °C	T sal., °C	WCp, kW/°C
h_1	750	350	45
h_2	550	250	40
c_1	300	900	43
c_2	200	550	20

Se desea diseñar una red de intercambiadores de calor usando una ΔT_{min} de 10°C. Use el método del punto de pliegue para diseñar una red con el mínimo consumo de servicios.

9.18 Dadas las cuatro corrientes que se muestran en la tabla, diseñe una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios y que use el número mínimo de unidades. Si por aspectos operacionales se prohibe el intercambio entre las corrientes h_1 y c_1, revise la solución que ha encontrado y de ser posible proponga una red alterna. ¿Se conserva el consumo mínimo de servicios cuando se incorpora esta restricción?

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C
h_1	250	50	2.0
h_2	210	50	3.0
c_1	70	250	2.5
c_2	40	175	2.3

9.19 Suponiendo un valor de ΔT_{min} de 10°C, diseñe una red de intercambiadores de calor con mínimos requerimientos energéticos para las siguientes corrientes.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C
h_1	150	40	7
h_2	190	60	5
c_1	40	120	10

9.20 Se desea utilizar las corrientes que se muestran en la tabla para diseñar una red de intercambiadores de calor.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C
h_1	400	150	5
h_2	300	50	10
h_3	200	50	15
h_4	150	50	20
c_1	250	300	100
c_2	100	150	12

Usando una ΔT_{min} de 10°C, diseñe una red que consuma la mínima cantidad de servicios.

9.21 Dos corrientes calientes se desean integrar energéticamente con dos corrientes frías, de acuerdo a los siguientes datos.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C
h_1	400	100	1
h_2	300	150	2
c_1	50	350	0.7
c_2	70	280	3

Usando un valor de $\Delta T_{mín}$ de 15°C, diseñe una red de intercambiadores de calor que consuma la mínima cantidad de servicios.

9.22 El siguiente problema de cuatro corrientes fue propuesto por Trivedi, O'Neill, Roach y Wood (*Computers Chem. Engng.*, 14, 6, 601-611, 1990).

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°K
H_1	250	70	3.5
H_2	170	70	6
C_1	60	160	5
C_2	110	260	4

Usando un valor de $\Delta T_{mín}$ de 10°C, diseñe una red de intercambiadores de calor con el mínimo consumo de energía.

9.23 El siguiente problema muestra características interesantes, y fue tomado del trabajo de Nishimura (*J. Optimization Theory Applic.*, 30, 423, 1980).

Corriente	T ent, °K	T sal, °K	WCp, kW/°K
H_1	443	293	0.5
H_2	416	393	2.0
H_3	438	408	0.5
H_4	448	423	1.0
C_1	273	434	1.0
Vapor	500	500	
Agua	277	280	

Diseñe una red de intercambiadores con mínimo consumo de energía. Suponga un valor de $\Delta T_{mín}$ de 10°K.

9.24 Cuatro corrientes quieren aprovecharse para integrar energía. La siguiente tabla proporciona los datos del problema (Ciric y Floudas, *Computers Chem. Engng.*, 14, 3, 241-250, 1990).

Corriente	T ent, °K	T sal, °K	WCp, kW/°K
H_1	95	75	5
H_2	80	75	50
C_1	30	90	10
C_2	60	70	12.5

Suponga una $\Delta T_{mín}$ de 30°K y diseñe una red de intercambiadores de calor con el mínimo consumo de servicios.

10

PREDICCIÓN DE ÁREAS EN REDES DE INTERCAMBIADORES DE CALOR

10.1 Construcción de las curvas compuestas
10.2 Curvas compuestas balanceadas
10.3 La gran curva compuesta
10.4 Predicción de áreas de transferencia de calor

Los principios del método del punto de pliegue tienen la virtud de lograr, mediante la cascada de calor, una predicción confiable del consumo mínimo de energía. Los requerimientos de áreas para los problemas mostrados en el capítulo anterior se obtienen después de que la red ha sido diseñada. Un complemento importante a los requerimientos de energía lo constituye la predicción del área de transferencia de calor que tendrá el diseño de una red. En este capítulo mostramos cómo establecer ese pronóstico de áreas. Comenzamos por mostrar algunos diagramas auxiliares basados en las propiedades de las corrientes.

10.1 Construcción de las curvas compuestas

De manera análoga al uso de la cascada de calor, los requerimientos mínimos de energía y el punto de pliegue pueden detectarse mediante la construcción de dos curvas compuestas, una que engloba todas las corrientes calientes (supercurva caliente) y otra todas las corrientes frías (supercurva fría). Esta construcción se realiza en una gráfica de temperatura contra entalpía. Para mostrar la construcción de estas curvas, consideremos nuevamente el problema de cuatro corrientes mostrado en la Tabla 9.3. En cada intervalo de temperatura se acumula el contenido de calor de las corrientes calientes por un lado y de las corrientes frías por el otro. Primero estimemos la cantidad de calor de cada tipo de corriente disponible en cada intervalo, lo cual por conveniencia se hará comenzando por la temperatura más baja para cada tipo de corriente.

Para las corrientes calientes:
$\Delta H_1 = (130 - 100)\,(0.95 + 0.84) = 53.7$
$\Delta H_2 = (180 - 130)\,(0.95 + 0.84) = 89.5$
$\Delta H_3 = (220 - 180)\,(0.95) = 38$
$\Delta H_4 = (250 - 220)\,(0.95) = 28.5$

Para las corrrientes frías:
$\Delta H_1 = (160 - 110)\,(1.0 + 0.9) = 95$
$\Delta H_2 = (200 - 160)\,(1.0 + 0.9) = 76$
$\Delta H_3 = (230 - 200)\,(0.9) = 27$

En seguida, se acumulan los ΔH's para cada tipo de corriente para preparar los datos a graficar. Las corrientes calientes comienzan con una entalpía acumulada de 0 a la temperatura más baja, mientras que a las corrientes frías se les agrega la cantidad mínima de calentamiento a todos los valores de entalpía, lo que ocasiona que la curva fría se ubique por debajo de la caliente a una distancia vertical igual a $\Delta T_{mín}$ en algún punto del diagrama (el cual representa el punto de pliegue). Los datos a graficar quedan como sigue.

Para las corrientes calientes:

T	H
100	0
130	53.7
180	143.2
220	181.2
250	209.7

Para las corrientes frías:

T	H	H corregida
110	0	53.7
160	95	148.7
200	171	224.7
230	198	251.7

La Figura 10.1 muestra las curvas compuestas que se obtienen para este problema; notar que el acercamiento máximo permisible entre las dos curvas está dado por el punto en el cual la distancia vertical es exactamente igual a $\Delta T_{mín}$, lo cual identifica el punto de pliegue. La región comprendida entre ambas curvas representa la máxima cantidad de energía integrable termodinámicamente. El excedente de la curva compuesta caliente, para el cual no hay una contraparte de la curva compuesta fría, debe de procesarse con servicios externos de enfriamiento, lo cual representa la cantidad mínima de enfriamiento. Similarmente, la parte de las corrientes frías que excede horizontalmente a la terminación de la curva compuesta caliente indica que no existen corrientes de proceso suficientemente calientes para integrarse con esta parte de la curva compuesta fría, y por lo tanto debe tratarse con servicios externos, reflejando así la cantidad mínima de calentamiento.

Para interpretar el diagrama, leemos que el punto máximo de acercamiento vertical entre las dos curvas, equivalente a $\Delta T_{mín}$ (20°F), representa el punto de pliegue igual a 110°F para las corrientes frías y de 130°F para las corrientes calientes, la distancia horizontal entre los extremos de las curvas en la parte baja de temperatura representa cantidad mínima de enfriamiento de 53.7×10^4 Btu/h, y la distancia horizontal entre los dos extremos de las curvas en la parte alta de temperatura representa la cantidad mínima de calentamiento de 42×10^4 Btu/h.

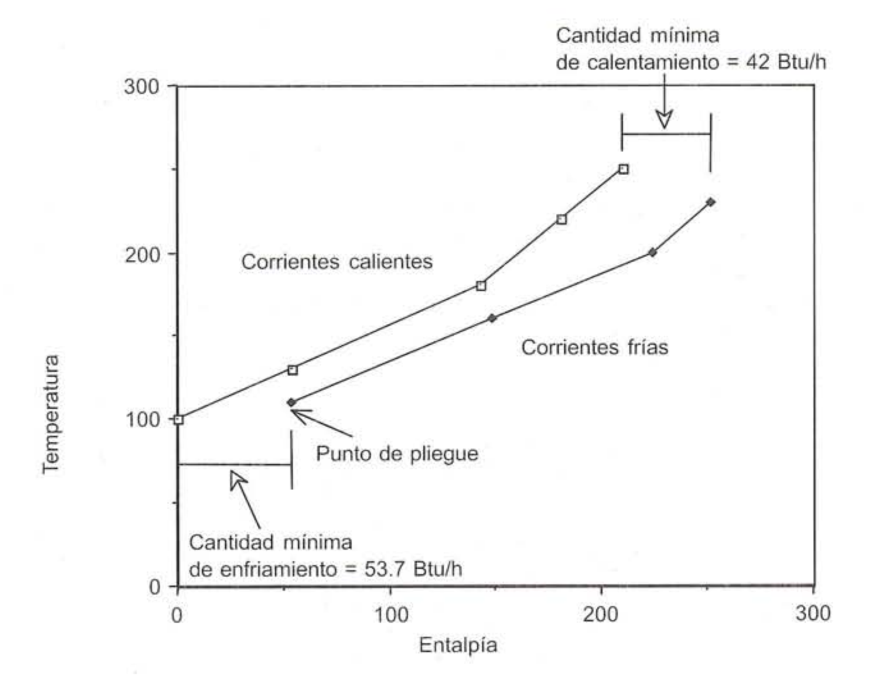


FIGURA 10.1
Curvas compuestas (las entalpías están graficadas en 10^4 Btu/h).

10.2 CURVAS COMPUESTAS BALANCEADAS

Las curvas compuestas que muestra la Figura 10.1 contienen únicamente las corrientes de proceso que se analizan para integrar energía entre ellas. El diagrama puede complementarse al incluir los niveles de temperatura de los servicios externos disponibles. Supongamos que por ejemplo para el problema en cuestión se dispone de vapor de calentamiento a 280°F, y de agua de enfriamiento a una temperatura promedio de 60°F (que puede representar por ejemplo una temperatura de entrada de 50°F con una temperatura de salida de 70°F). La curva compuesta balanceada que se obtiene se muestra en la Figura 10.2. Los servicios cierran el diagrama completamente, de tal forma que toda la parte de las corrientes calientes tiene una contraparte fría para ceder calor.

10.3 LA GRAN CURVA COMPUESTA

Cuando en cada intervalo de temperatura se engloban ambos tipos de corrientes y se acumula el déficit o superávit resultante, se obtiene la gran curva compuesta del proceso. Los puntos para generar este diagrama son básicamente los de la cascada de calor del proceso. Para mostrarlo, consideremos de nuevo el ejemplo numérico que se usó para ilustrar el método del punto de pliegue. Dados los ΔH's de cada intervalo, se forma la cascada sumando cada uno al del intervalo siguiente, y corrigiendo luego mediante la adición del número negativo más significativo, lo cual considerado desde el punto de vista de un diagrama temperatura-entalpía equivale a trasladar horizontalmente la gráfica en una cantidad dada por ese número negativo, de tal manera que todos los valores de entalpía son no-negativos. Notar el uso de temperaturas modificadas para este tipo de diagramas. La siguiente tabla muestra los cálculos relevantes para la construcción de la gran curva compuesta:

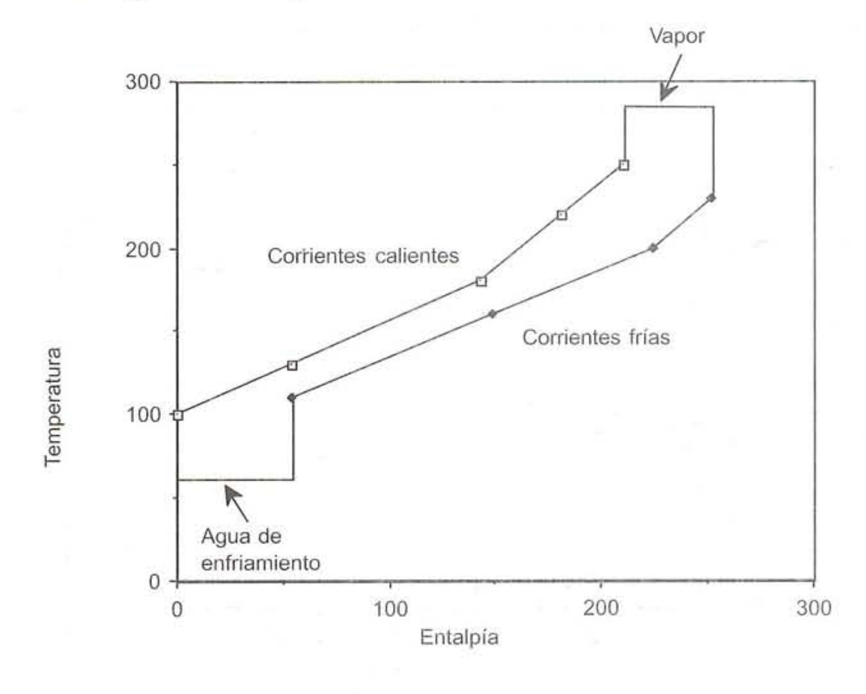


FIGURA 10.2
Curvas compuestas balanceadas. (Entalpías en 10^4 Btu/h).

T	H original	H modificada
230	0	42
200	1.5	43.5
160	–36.5	5.5
110	–42	0
80	11.7	53.7

El diagrama resultante se muestra en la Figura 10.3. Del diagrama, se identifica la cantidad mínima de calentamiento como la coordenada correspondiente al primer punto, la cantidad mínima de enfriamiento como la coordenada correspondiente al último punto, y el punto de pliegue como el punto extremo de la izquierda, el cual ha sido ajustado a una coordenada de entalpía igual a 0.

10.4 Predicción de áreas de transferencia de calor

Un aspecto adicional al del consumo de servicios para la estimación del costo anual de una red es el conocimiento de las áreas del equipo necesario. El consumo mínimo de servicios se puede predecir con precisión mediante el concepto de cascada de calor, representado numéricamente o a través de algún diagrama de curvas compuestas. El área total de transferencia de calor también puede estimarse antes del diseño de la red haciendo uso de las curvas compuestas. Esta característica reviste especial valor, porque al estimar áreas y consumo de energía antes del diseño puede tenerse el pronóstico del costo de la red antes de conocer su estructura.

La base de la estimación del área total de transferencia de calor requerida consiste en suponer que una corriente ficticia caliente (dada por la supercurva caliente) intercambia calor con una corriente ficticia fría (dada por la supercurva fría) en un intercambiador a contracorriente. La ecuación de diseño para intercambiadores de calor se aplica de manera directa:

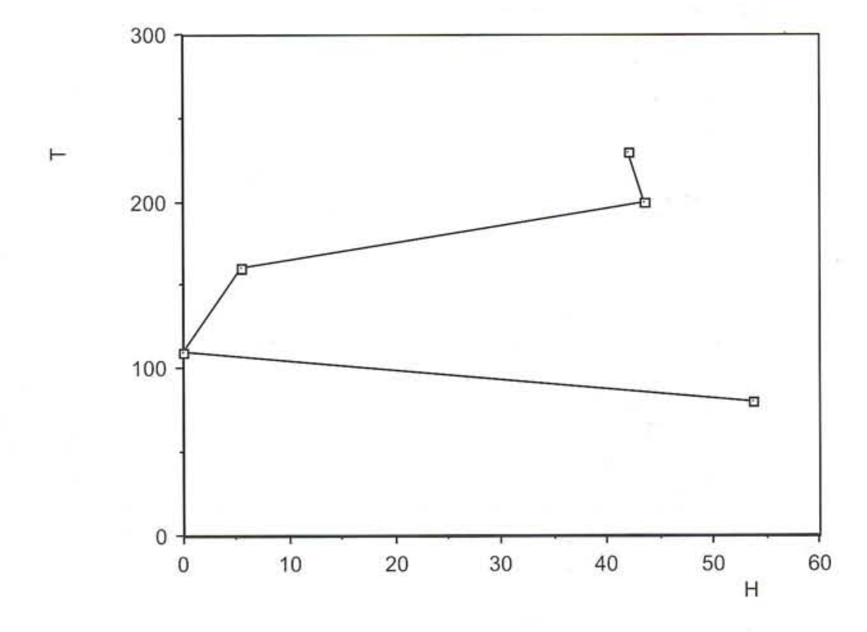


FIGURA 10.3
Gran curva compuesta.

$$Q = UA\Delta T_{ML} \tag{10.1}$$

Si se suponen *intercambios verticales*, lo cual implica que una sección caliente intercambia calor directamente con su contraparte fría localizada verticalmente debajo de ella, se espera un uso eficiente de temperaturas, tal que el área del equipo tienda a un valor mínimo.

El único artificio necesario es aplicar esta ecuación de diseño en cada sección k dada por el cambio de pendiente de cualquiera de las dos curvas compuestas, de tal forma que el área predicha para la red estaría dada por:

$$A = \frac{1}{U}\sum_{k}\frac{Q_k}{\Delta T_{MLk}} \tag{10.2}$$

Esta ecuación, conocida también como *fórmula Bath*, se aplica sólo para el caso en que el coeficiente global de transferencia de calor sea el mismo para todos los intercambios. El valor del coeficiente global depende de los coeficientes de película de los fluidos involucrados en el proceso de intercambio de calor:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_{cal}} + \frac{1}{h_{frio}} \tag{10.3}$$

Si se incluye esta dependencia, entonces la ecuación que predice el área necesaria de intercambio de calor para cada intervalo k en función de los coeficientes individuales de película puede expresarse como:

$$A_k = \frac{1}{\Delta T_{MLk}}\left(\sum_{i}^{corr.cal.}\frac{Q_i}{h_i} + \sum_{j}^{corr.frias}\frac{Q_j}{h_j}\right) \tag{10.4}$$

de tal manera que la estimación del área total se obtiene al sumar las áreas de cada intervalo k. De la suma de las áreas definidas por la sección de intercambio comprendida entre ambas curvas compuestas se obtiene la predicción del área de intercambio necesaria entre las corrientes del proceso. Para completar la estimación y obtener el área total debe agregarse la predicción de las áreas necesarias para calentadores y enfriadores, para lo cual es necesario usar las curvas compuestas balanceadas y estimar las áreas para calentadores y enfriadores de la misma manera.

Ejemplo 10.1

Considere el problema de 4 corrientes que se usó en el Capítulo 9 para mostrar el método del punto de pliegue. Complemente la cascada de calor con la predicción del área requerida por la red usando la fórmula

Bath. Suponga que los coeficientes de película son constantes e iguales para todas las corrientes, con un valor de 400 Btu/h ft^2 °F.

Solución

El primer paso consiste en la construcción de las curvas compuestas, las cuales se muestran en las figuras 10.1 para las corrientes de proceso y 10.2 para corrientes y servicios. Tomemos las curvas compuestas balanceadas para predecir el área total requerida incluyendo calentadores y enfriadores. La Figura 10.4 ilustra la forma en que se dividen los bloques de las curvas compuestas para estimar las áreas de cada uno de ellos. En total, se tienen cinco divisiones al considerar los cambios de pendiente de alguna de las curvas.

Usando la Ecuación 10.4, se estima el área para cada intervalo. Por ejemplo, para el intervalo 2, la curva caliente va de 130 a 180°F, mientras que la curva fría tiene temperaturas correspondientes de 110 y 157°F. La carga térmica del intervalo es de

$$Q_2 = 143.2 - 53.7 = 89.5 \text{ Btu/h}$$

Con estos datos y el uso de los valores de los coeficientes de película, la Ecuación 10.4 puede aplicarse para este intervalo, para obtener una estimación de

$$A_2 = 208.5 \text{ ft}^2$$

Similarmente, los demás intervalos se procesan para obtener los valores mostrados en la tabla de la página siguiente.

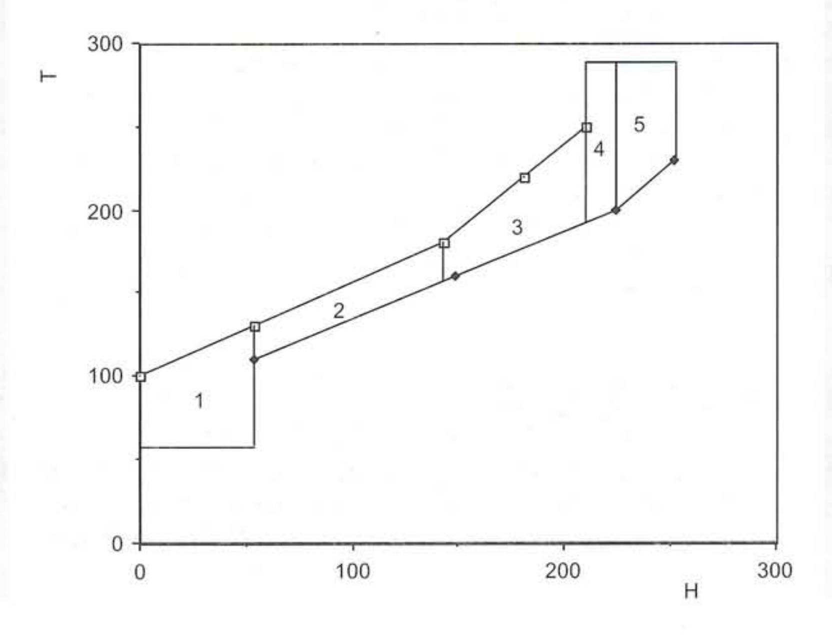


FIGURA 10.4
División de las curvas compuestas para la estimación de áreas requeridas.

Intervalo	Área, ft^2
1	50.1
2	208.5
3	87.9
4	8.9
5	21.2
Total	376.6

El área mínima estimada para una red es de 376.6 ft^2. De este valor, 30.1 ft^2 corresponden a calentadores, 50.1 ft^2 a enfriadores, y 296.4 ft^2 a corrientes de proceso; el área requerida proceso-proceso está ubicada en su totalidad en la sección de arriba del punto de pliegue.

En el Capítulo 9 se obtuvo una red con el mínimo consumo de servicios para este problema. El lector puede corroborar que el área total requerida por la red diseñada es de 396.4 ft^2, lo cual está por encima de la predicción hecha en un 5%.

Para obtener un costo estimado de la inversión en equipo antes del diseño de la red, se puede dividir el área correspondiente a cada sección de la red con respecto al punto de pliegue por el número mínimo de unidades que se requiere en cada sección, y aplicar la correspondiente ecuación de costos para cada unidad estimada. Esta predicción de área y su costo permite un procedimiento de preoptimización del valor de ΔT_{min} que se debe usar para el diseño de la red, con el fin de obtener el costo anual mínimo.

Debe de enfatizarse que la fórmula Bath produce una estimación válida del área mínima necesaria para una red sólo para el caso en que los coeficientes de película sean iguales para todas las corrientes. De otra manera, su aplicación para la estimación de áreas requeridas puede ser aceptable, pero el valor obtenido no representa una cota mínima a los requerimientos de área de intercambio de calor.

REFERENCIAS

La fórmula Bath para predicción de áreas fue reportada en

Townsend, D.W. y B. Linnhoff, Surface Area Targets for Heat Exchanger Networks, *IChemE, 11th Annual Res. Meeting*, Bath, U.K. (1984).

Una extensión de la fórmula Bath aplicable a casos con coeficientes de película diferentes fue desarrollada por:

Serna, M., J. Reyes y A. Jiménez, Algoritmo de cálculo de los objetivos de área mínima para la síntesis de redes de intercambiadores de calor con coeficientes de transferencia de calor diferentes, *Avances en ingeniería química*, 7, 3, 264-271 (1998).

PROBLEMAS

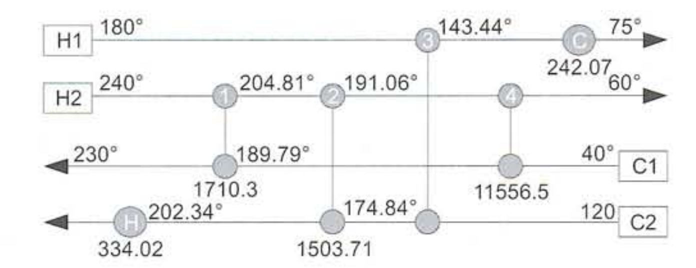
10.1 Zamora y Grossmann (*Computers Chem. Engng.*, 21, Suppl., S65-S70, 1997) usaron un algoritmo de optimización global para resolver el siguiente problema:

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C	h, kW/m^2°C
H1	180	75	30	0.15
H2	240	60	40	0.10
C1	40	230	35	0.20
C2	120	300	20	0.10
Agua	25	40		0.50
Vapor	325	325		2.00

Costo de intercambiadores y enfriadores (\$/año) = 15,000 + 30 $A^{0.8}$, A en m^2
Costo de calentadores (\$/año) = 15,000 + 60 $A^{0.8}$, A en m^2
Costo de agua de enfriamiento = 10 \$/kW año
Costo de vapor de calentamiento = 110 \$/kW año

a) Diseñe una red de intercambiadores de calor con mínimo consumo de energía usando un valor de ΔT_{min} entre 5 y 10°C. Compare el costo con el óptimo reportado por Zamora y Grossmann de 419.98×10^3 \$/año.
b) Realice una preoptimización de ΔT_{min} usando la fórmula Bath para la predicción del área requerida. Compare el valor óptimo predicho de ΔT_{min} con el usado en la parte (a).
c) Diseñe la red al valor obtenido en el inciso (b) y compare el resultado con el óptimo reportado.

10.2 Zamora y Grossmann, usando un modelo de programación mixta-entera no lineal, reportan la siguiente estructura óptima para el problema anterior.



a) Compare esta estructura con la solución obtenida del problema 10.1.
b) Trate de reportar un análisis de la topología óptima de la red. ¿Cómo se ve influenciada esta estructura óptima dado el modelo económico usado?

10.3 La siguiente tabla muestra el caso propuesto por Yee y Grossmann (*Computers Chem. Engng.*, 14, 10, 1165-1184, 1990), que consiste de una corriente fría y cinco corrientes calientes.

Corriente	T ent, °K	T sal, °K	WCp, kW/°K
H1	500	320	6
H2	480	380	4
H3	460	360	6
H4	380	360	20
H5	380	320	12
C1	290	660	18
Vapor	700	700	
Agua	300	320	

U = 1.0 kW/m^2 °K, para todos los intercambiadores
Costo anual = 1,200 $A^{0.6}$, A en m^2
Costo de vapor = 140 $/kW año
Costo de agua = 10 $/kW año

Siga la secuencia de solución planteada en el problema 10.1 y compare los resultados con el óptimo reportado de 575,000 $/año.

10.4 Los siguientes datos se aplican a una planta de aromáticos (Linnhoff y Ahmad, *Computers Chem. Engng.*, 14, 7, 729-750, 1990), a partir de los cuales se quiere diseñar una red de intercambiadores de calor.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°K	h, kW/m^2 °K
H1	327	40	100	0.50
H2	220	160	160	0.40
H3	220	60	60	0.14
H4	160	45	400	0.30
C1	100	300	100	0.35
C2	35	164	70	0.70
C3	85	138	350	0.50
C4	60	170	60	0.14
C5	140	300	200	0.60
Aceite	330	250		0.50
Agua	15	30		0.50

Costo de intercambiadores ($) = 10,000 + 350 A, con A en m^2
Vida de la planta = 5 años
Costo de aceite = 60 $/kW año
Costo de agua = 6 $/kW año

Diseñe una red de intercambiadores a un valor selecto de ΔT_{min} y compare con la solución reportada de Linnhoff y Ahmad, que tiene un costo de 2.96 × 10^6 $/año. Compare las predicciones obtenidas con los resultados del diseño de la red.

10.5 El siguiente problema de 10 corrientes representa un caso de umbral en su consumo de energía. Se ha reportado un costo anual mínimo de 43,943 $/año para este caso (Flower y Linnhoff, *AIChEJ*, 24, 4, 642-654, 1978).

Corriente	T ent, °K	T sal, °K	WCp, kW/°K
H1	433	366	8.79
H2	522	411	10.55
H3	544	422	12.56
H4	500	339	14.77
H5	472	339	17.73
C1	355	450	17.28
C2	366	478	13.90
C3	311	494	8.44
C4	333	433	7.62
C5	389	495	6.08
Vapor	509	509	
Agua	311	355	

U = 0.852 kW/m^2 °K para intercambios sin vapor
U = 1.136 kw/m^2 °K para intercambios con vapor
Costo anual = 145.63 A$^{0.6}$ para todos los intercambiadores
Costo de vapor = 37.64 $/kW año
Costo de agua = 18.12 $//kW año

a) Establezca una predicción de los requerimientos de energía y de área para un valor de ΔT_{min} de 8°C.
b) Diseñe una red de intercambiadores de calor con mínimo consumo de energía y compare sus requerimientos y su costo anual con el predicho en la parte (a).
c) ¿Es éste un buen valor de ΔT_{min}?

10.6 Considere el siguiente conjunto de corrientes y datos de diseño de intercambio de calor.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, MW/°C
H1	150	50	0.2
H2	170	40	0.1
C1	50	120	0.3
C2	80	110	0.5
Vapor	180	180	
Agua	20	40	

U = 100 W/m^2 °C para todos los intercambiadores

Usando las ecuaciones de costos del problema 10.1 y un valor de ΔT_{min} de 10°C, obtenga una red de intercambiadores de calor que minimice el consumo de energía y tenga un uso eficiente del área requerida.

10.7 Las siguientes corrientes de proceso han sido consideradas por Linnhoff y Ahmad (*Computers Chem. Engng.*, 14, 7, 729-750. 1990).

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C
H1	200	35	3.8
H2	200	20	2.0
C1	30	180	4.0
C2	50	51	532.0
C3	10	180	2.2
Aceite	230	200	
Agua	1	15	

U = 100 W/m^2 °C para todos los intercambiadores.

a) Construya el diagrama de curvas compuestas para un valor de $\Delta T_{mín}$ de 10°C. Estime los requerimientos de área arriba y abajo del punto de pliegue.

b) Diseñe dos alternativas de intercambio de calor que consuman la mínima cantidad de servicios, una que agote completamente la corriente C1 y otra que agote completamente la corriente C2 mediante integración de energía. Compare los requerimientos de área de cada una de estas alternativas y comente las diferencias que se obtengan.

10.8 Ahmad, Linnhoff y Smith (*Computers Chem. Engng.*, 14, 7, 751-767, 1990) reportan el siguiente problema de 5 corrientes.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C	h, kW/m^2 °C
H1	159	77	22.85	1.0
H2	267	80	2.04	0.40
H3	343	90	5.38	5.00
C1	26	127	9.33	0.10
C2	118	265	19.61	5.00
Vapor	300	300		0.50
Agua	20	60		2.00

Usando un valor de ΔT_{min} de 30°C, se reporta un requerimiento de área de 3,000 m^2. Construya un diagrama de curvas compuestas y corrobore ese resultado. Diseñe una red de intercambiadores de calor y evalúe el área requerida por el diseño. ¿Es la predicción de requerimientos de área satisfactoria?

10.9 Repita el problema anterior para un valor de ΔT_{min} de 10°C. Compare resultados.

10.10 El siguiente conjunto de 5 corrientes calientes y 4 corrientes frías constituye parte de un proceso químico.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C	h, kW/m^2 °C
H1	120	65	25	0.50
H2	80	50	150	0.25
H3	135	110	145	0.30
H4	220	95	10	0.18
H5	135	105	130	0.25
C1	65	90	75	0.27
C2	75	200	70	0.25
C3	30	210	50	0.15
C4	60	140	25	0.45
Vapor	250	250		0.35
Agua	15	16		0.20

Costo de intercambiadores = 30,800 + 750 $A^{0.8}$ (A < 550 m^2), A en m^2
Vida de la planta = 6 años
Costo de vapor = 110 \$/kW año
Costo de agua = 10 \$/kW año

a) Usando un valor de ΔT_{min} de 10°C, obtenga la predicción de área y energía para una red de intercambio de calor. Indique cuál es el pronóstico del costo anual de la red.

b) Diseñe una red de intercambiadores y compare la predicción de área con el valor obtenido después del diseño. Reporte el costo anual del diseño.

10.11 Se desea diseñar una red de intercambiadores de calor para el siguiente caso (Colberg y Morari, *Computers Chem. Engng.*, 14, 1, 1-22,1990).

Corriente	T ent, °K	T sal, °K	WCp, kW/°K	h, kW/m^2 °K
H1	393	343	4	2.0
H2	405	288	6	0.2
C1	293	493	5	2.0
C2	353	383	10	0.2
Vapor	520	520		2.0
Agua	278	288		2.0

a) Para una ΔT_{min} de 10 K, obtenga la predicción de energía y áreas para cualquier red a partir del diagrama de curvas compuestas.

b) Diseñe una red de intercambiadores que consuma la mínima cantidad de servicios y compare los requerimientos de área con los predichos por la fórmula Bath.

10.12 Nishimura (*J. Optimization Theory Applic.*, 30, 423, 1980) propuso el siguiente caso de cinco corrientes.

Corriente	T ent, °K	T sal, °K	WCp, kW/°K	h, kW,m^2 °K
H1	443	293	0.5	2.0000
H2	416	393	2.0	0.2857
H3	438	408	0.5	0.0645
H4	448	423	1.0	0.0408
C1	273	434	1.0	2.0000
Vapor	500	500		2.0000
Agua	277	280		2.0000

Para una $\Delta T_{mín}$ de 10 °K, diseñe una red de intercambiadores con mínimo consumo de energía y compare los requerimientos predichos de área con los obtenidos después del diseño.

10.13 La siguiente tabla describe las características de siete corrientes de proceso que quieren usarse para integrar energía.

Corriente	T ent, °K	T sal, °K	WCp, kW/°K	h, kW/m^2 °K
H1	626	586	9.802	1.25
H2	620	519	2.931	0.05
H3	528	353	6.161	3.20
C1	497	613	7.179	0.65
C2	389	576	0.641	0.25
C3	326	386	7.627	0.33
C4	313	566	1.690	3.20
Vapor	650	650		3.50
Agua	293	308		3.50

Use un valor de ΔT_{min} de 20 °K y obtenga las predicciones de área y energía para este problema. Diseñe la red y corrobore las predicciones hechas.

10.14 Gundersen y Grossmann (*AIChE Annual Meeting*, Washington D.C., 1988) presentan las siguientes corrientes:

Corriente	T ent, °K	T sal, °K	WCp, kW/°K	h, kW/m^2 °K
H1	423	333	20	0.1
H2	363	333	80	0.1
C1	293	398	25	0.1
C2	298	373	30	0.1
Vapor	453	453		0.1
Agua	283	288		0.1

Costo de intercambiadores = 8,600 + 670 $A^{0.83}$

Usando una ΔT_{min} de 20 °K obtenga la predicción de área y su costo. Corrobore esa predicción mediante el diseño de la red de intercambiadores de calor.

10.15 Trivedi, O'Neill, Roach y Wood (*Computers Chem. Engng*, 14, 6, 601-611, 1990) proponen el siguiente problema de cuatro corrientes.

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°K
H1	170	60	3
H2	150	30	1.5
C1	20	135	2
C2	80	140	4

Suponiendo que se tiene vapor disponible a 200°C y agua de enfriamiento a 15°C, estime el área necesaria para una red de intercambiadores de calor. Diseñe la red y compare resultados. Suponga un valor para el coeficiente global de transferencia de calor de 100 kW/m^2 °C para todos los intercambios. Suponga un valor de $\Delta T_{mín}$ de 10°C.

10.16 Los siguientes datos de un problema industrial están tomados del trabajo de Floudas, Ciric y Grossmann (*AIChEJ*, 32, 267-297, 1986).

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C
H1	160	110	7.032
H2	249	138	8.44
H3	227	106	11.816
H4	271	146	5.6
C1	96	160	9.144
C2	116	217	7.296
C3	140	250	18

Si se toma un coeficiente de transferencia de calor igual a 100 kW/m^2 °C para todos los intercambiadores, un vapor disponible a 300°C, agua de enfriamiento a 25°C, y una ΔT_{min} de 10°C, haga un análisis de los requerimientos de área y de energía predichos y los requeridos después del diseño de la red.

11

ANÁLISIS DE REDES DE INTERCAMBIADORES DE CALOR EXISTENTES

11.1 Diagnóstico de la red
11.2 El principio básico de la revisión
11.3 Establecimiento de objetivos

Existen procesos instalados que operan con alguna red de intercambiadores de calor que fue diseñada bajo esquemas de conocimiento o de escenarios económicos diferentes a los actuales. En esos casos, no es raro encontrar que el ahorro de energía que se obtiene representa una fracción del máximo ahorro que puede obtenerse con un diseño nuevo. En este capítulo se muestra cómo los principios fundamentales de diseño de redes de intercambiadores de calor a partir del método del punto de pliegue pueden usarse para modificar redes existentes.

11.1 Diagnóstico de la red

El primer paso para revisar alguna red existente es cuantificar su eficiencia. Una manera de hacerlo es comparando el consumo de servicios externos de la red con el mínimo consumo de servicios; el exceso de energía utilizada se buscará integrar, en forma total o parcial, mediante cambios estratégicos de la red existente.

El consumo mínimo de energía depende del valor de $\Delta T_{mín}$. Para fines de diseño, es posible realizar una pre-optimización de esta variable. Para fines de revisión de redes existentes, sin embargo, el problema es menos claro. Pudiera pensarse en tres opciones:

1- Formular un problema de diseño y preoptimizar $\Delta T_{mín}$. Usar ese valor para revisar la red.

2- Examinar la red existente y detectar la menor diferencia de temperaturas que se tenga en alguno de los intercambiadores de calor; usar ese valor como ΔT_{min} para la revisión de la red.

3- Usar algún tipo de pronóstico del efecto de $\Delta T_{mín}$ en la red al revisarse.

Cabe la posibilidad de usar algún valor heurístico de $\Delta T_{mín}$, de acuerdo a la experiencia y conocimiento del escenario económico de algún diseñador.

11.2 El principio básico de la revisión

Pudiera pensarse en que si la red existente es ineficiente, entonces lo más conveniente sería diseñar una nueva red y dejar a un lado la red anterior. Este procedimiento, aunque tendría cada vez más incentivo a medida que los precios de los energéticos aumentan, tiene el gran inconveniente de no aprovechar la inversión que ya se ha hecho en el equipo instalado, además de requerir de una inversión fija adicional mayor. Una mejor estrategia consiste en buscar utilizar el equipo existente en su mayor parte, y corregir solamente algún punto crítico de la red. En términos de los conceptos de diseño que se han presentado, la estrategia consiste en detectar el punto de pliegue de la red existente y corregir los intercambios que se llevan a cabo a través de ese punto.

Ejemplo 11.1

Considérese la red de intercambiadores mostrada en la Figura 11.1, la cual es parte de un proceso industrial que se encuentra en operación. Los datos energéticos y de coeficientes de película de cada corriente

se dan en la Tabla 11.1. Usando un valor de $\Delta T_{mín}$ de 19°C, haga un diagnóstico de la red y proponga alguna red modificada que mejore la eficiencia de la red existente.

Tabla 11.1 Datos energéticos de corrientes de proceso.		
Corriente	WCp, kW/°C	h, W/cm^2
1	228.5	400
2	20.4	300
3	53.8	250
4	93.3	150
5	196.1	500

Datos de costos:
Costo de un intercambiador = 8,600 + 670 A0.83; (A en m2)
Costo de combustible = 63,360 \$/(MW)(año)

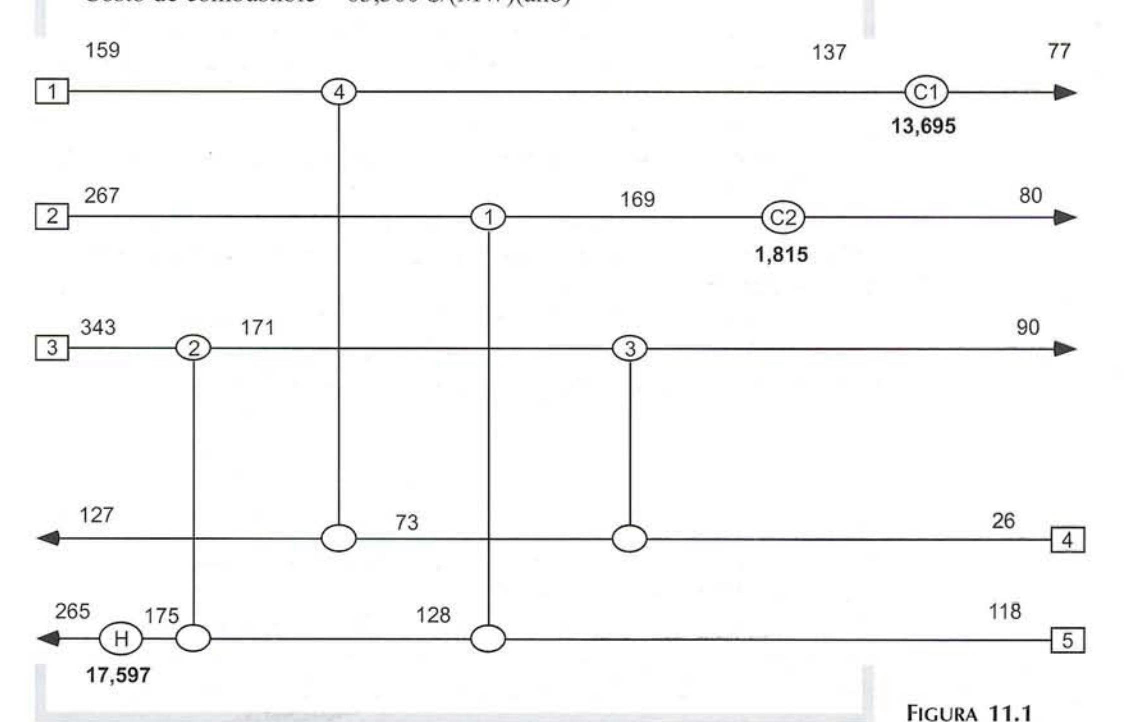


FIGURA 11.1
Red de intercambiadores de calor existente.

Solución

El primer punto es desarrollar una cascada de calor para determinar los requerimientos mínimos de servicios y el punto de pliegue. Al hacer este procedimiento, se encuentran las siguientes propiedades de la red para el valor establecido de $\Delta T_{mín}$ de 19°C:

Consumo mínimo de calentamiento: 12,410.1 kW
Consumo mínimo de enfriamiento: 10,323,3 kW
Punto de pliegue:
Para corrientes calientes, 159°C
Para corrientes frías, 140°C

El consumo de servicios que se reporta de la red existente equivale a:

Cosumo real de calentamiento: 17,597 kW
Consumo real de enfriamiento: 13,695 + 1,815 = 15,510 kW

Por lo tanto existe un potencial de ahorro de

Ahorro potencial de calentamiento = 5,186.9 kW
Ahorro potencial de enfriamiento = 5,186.9 kW

El siguiente objetivo es corregir el diseño de la red para lograr la mayor fracción posible de este ahorro potencial. Una vez que se ha desarrollado la cascada de calor, conviene redibujar la red con respecto al punto de pliegue para detectar con mayor claridad los intercambios que violan el principio básico de no intercambiar calor a través de él; estos intercambios son los candidatos naturales a corregir y es de esperarse que sean los responsables, en alto grado cuando menos, del exceso de energía que consume la red.

La Figura 11.2 muestra la red existente con respecto al punto de pliegue. Puede verse que existen cuatro equipos que cruzan este punto, un enfriador (C2) y tres intercambiadores (1, 2 y 3). Estos casos deben corregirse. Al desconectar estos intercambiadores se tiene el esquema mostrado en la Figura 11.3, en donde puede observarse que el intercambiador 4, el enfriador C1 y el calentador se conservan en las posiciones que tenían originalmente. Al igual que para fines de diseño, conviene hacer la revisión de la red en las dos secciones que se generan con respecto al punto de pliegue. Un cálculo útil es el de los calo-

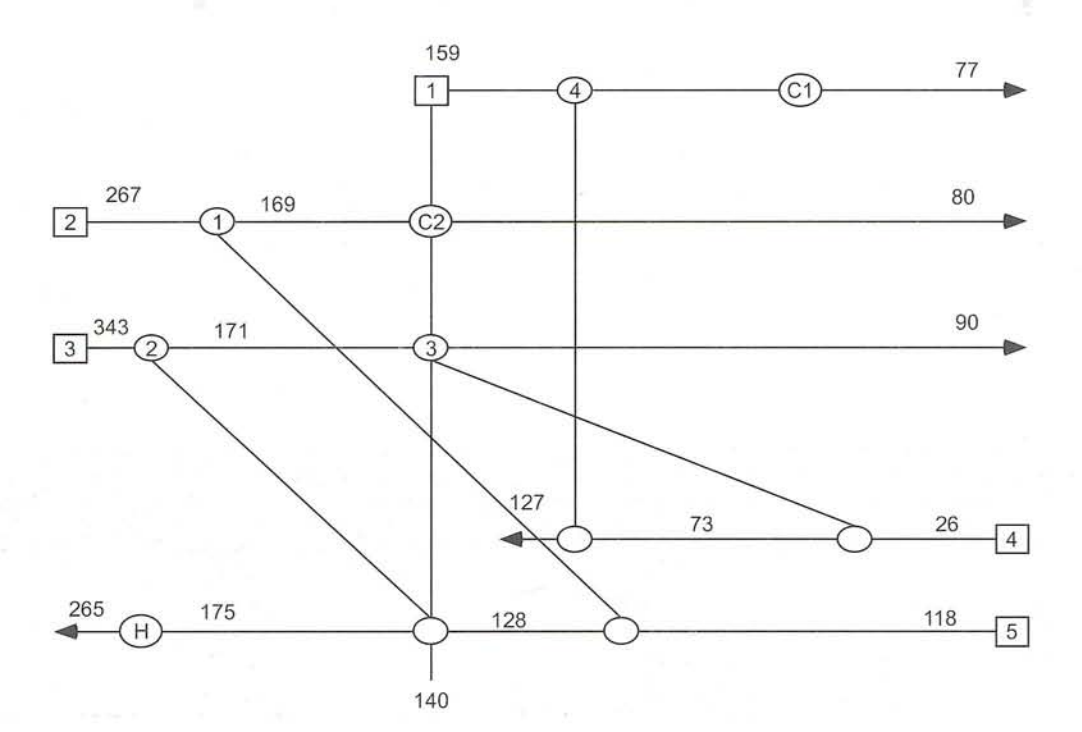
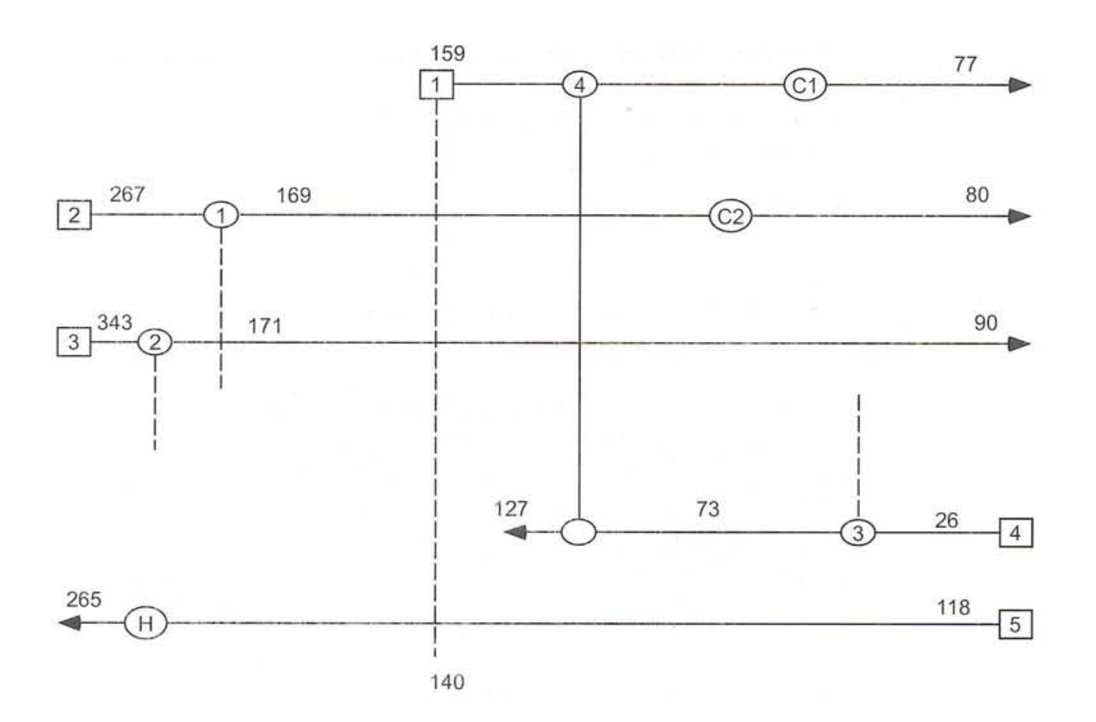


FIGURA 11.2
Red existente con respecto al punto de pliegue.



res que tiene cada corriente en cada sección de la red; por ejemplo, la corriente 2 tiene una cantidad de calor por encima del punto de pliegue de:

FIGURA 11.3
Identificación de intercambiadores mal colocados.

$$Q = 20.4\ (267 - 159) = 2{,}203\ \text{kW}$$

mientras que por debajo del punto de pliegue su calor disponible es

$$Q = 20.4\ (159 - 80) = 1{,}612\ \text{kW}$$

La Tabla 11.2 resume este tipo de cálculos para cada corriente.

Las modificaciones que se pueden proponer no son únicas; lo importante, sin embargo, es conservar los principios básicos del método del punto de pliegue. A continuación se describe una posible modificación de la red existente, dividiendo el proceso de revisión en dos secciones.

Tabla 11.2 Calores disponibles y requeridos por cada corriente con respecto al punto de pliegue (kW).

Corriente	Qarriba	Qabajo
1	0	18,737
2	2,203	1,612
3	9,899	3,712
4	0	9,423
5	24,512	4,314

Revisión por debajo del punto de pliegue

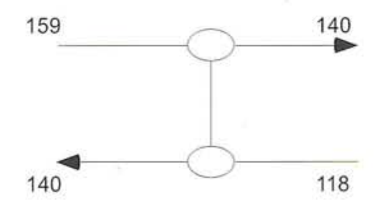
1- Dejar el enfriador C2 abajo del punto de pliegue con una carga térmica reducida.

$$Q_{C2} = 1{,}612 \text{ kW}$$

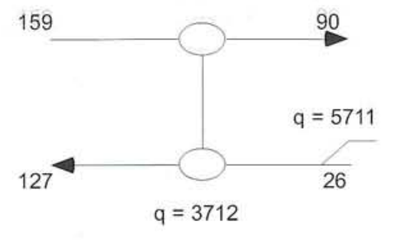
Esquemáticamente, el enfriador C2 cumple la siguiente función:



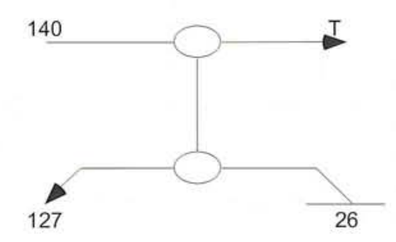
2- Prevenir el uso de calentamiento por debajo del punto de pliegue; incorporar por lo tanto un nuevo intercambiador (A) para la corriente 5 e integrarla con la corriente 3 o con la corriente 1. La corriente 1 tiene suficiente carga térmica. Después del intercambio, la corriente 5 sale a 140°C. A continuación se muestra esta sección de la red revisada:



3- Procesar la corriente 3 con la corriente 4 usando el intercambiador disponible. Si fijamos las temperaturas de entrada y de salida de cada corriente, entonces debe dividirse la corriente 4. El resultado de este intercambio se muestra en seguida.



4- La otra parte de la corriente 4 se hace pasar por el intercambiador que no se modifica. Con una carga térmica del intercambiador de 5711 kW, la temperatura de salida de la corriente caliente se calcula como T = 115°C.



5- Finalmente, la nueva carga térmica del enfriador C1 se reduce a

$$Q_{C1} = 228.5\ (115 - 77) = 8683\ \text{kW}$$

Como resultado de esta revisión, la red modificada por debajo del punto de pliegue queda como se muestra en la Figura 11.4. La nueva carga térmica de enfriamiento es de 8,683 + 1,612 = 10,295 kW, lo cual coincide con los requerimientos mínimos establecidos por la cascada de calor.

Revisión por encima del punto de pliegue

Existen dos corrientes calientes y una corriente fría. Se puede dividir la corriente fría y usar los intercambiadores existentes como base. Ambas corrientes calientes se satisfacen y la temperatura de salida de la corriente fría después de ambos intercambios resulta ser 202°C. Lo único que queda es terminar de procesar la corriente fría hasta su temperatura terminal de 265°C usando el calentador disponible. La carga térmica de calentamiento se reduce a 12,354 kW, la mínima cantidad requerida. La Figura 11.5 muestra la parte de la red modificada en esta sección.

Red modificada

La red completa que se obtiene después de las modificaciones propuestas consume la mínima cantidad de servicios, y se muestra en la Figura 11.6. Queda por llevar a cabo el análisis económico que implica esta propuesta.

Análisis de áreas requeridas y disponibles

El nuevo esquema incluye un intercambiador nuevo y requiere de una revisión de las áreas que se necesitan con respecto a las áreas de los equipos que estaban disponibles originalmente. A partir de la ecuación

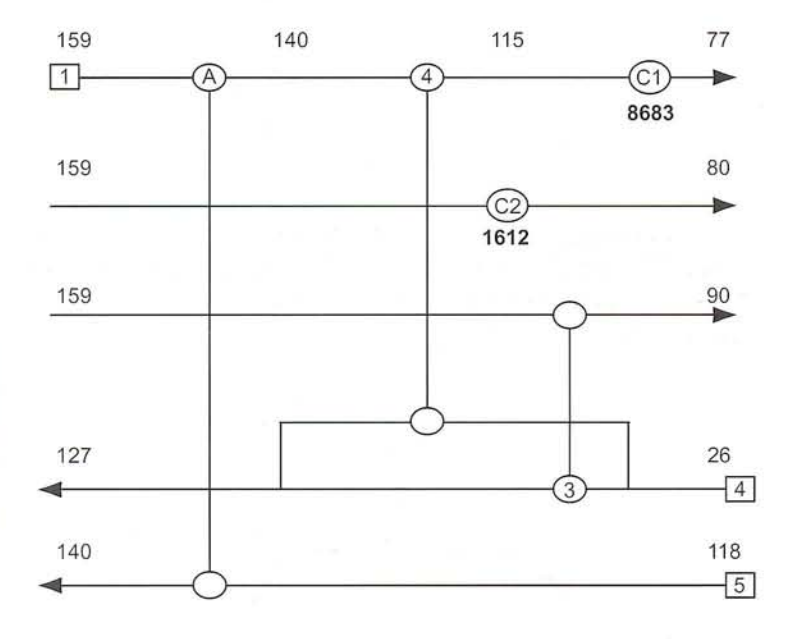


FIGURA 11.4
Red revisada por debajo del punto de pliegue.

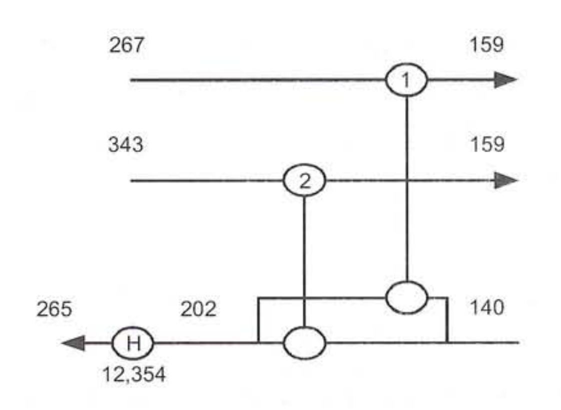


FIGURA 11.5
Red revisada por debajo del punto de pliegue.

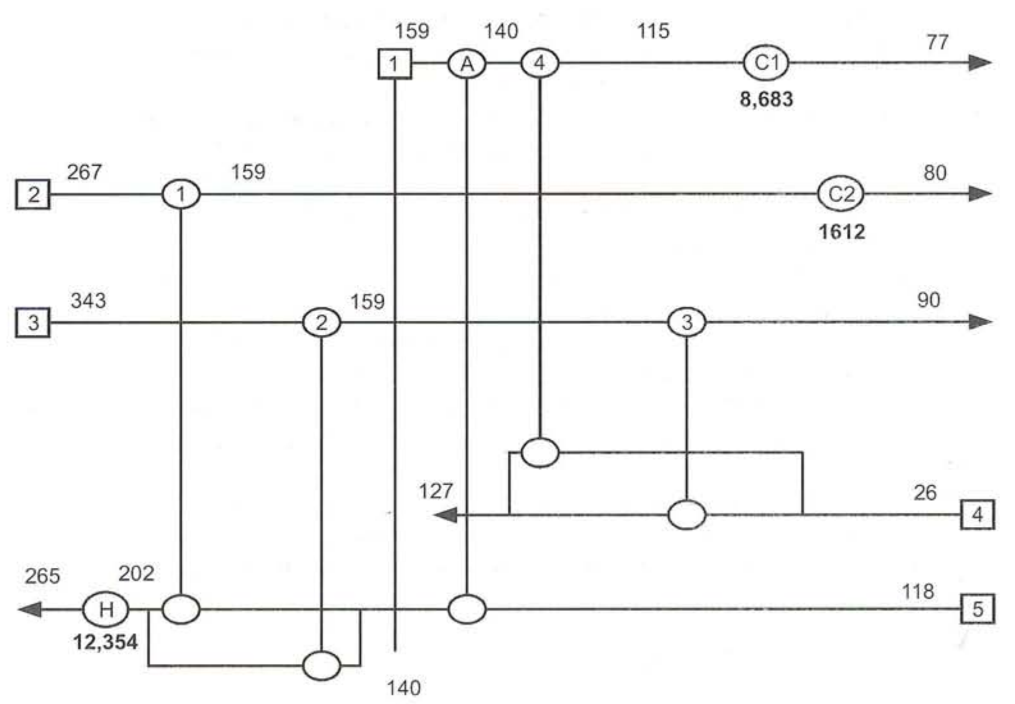


FIGURA 11.6
Red modificada.

de diseño para intercambiadores de calor puede estimarse el área requerida para cada intercambio. Este cálculo y su comparación con áreas existentes se resume en la Tabla 11.3.

En base a las áreas adicionales requeridas y al escenario económico proporcionado, el costo de inversión adicional para este proyecto sería de $\$0.539 \times 10^6$. Los ahorros extra de energía que se obtienen equivalen a

Tabla 11.3 Comparación de áreas (m^2).

Intercambiador	Área requerida	Área disponible
A	947	—
1	314	120
2	979	593
3	857	586
4	1,326	1,000

Ahorro = 63,360 \$/(MW)(año) x 5.243 MW = 0.332 x 10^6 \$/año

El tiempo de recuperación de la inversión extra sería entonces,

t = 0.5398/0.332 = 1.62 años

11.3 Establecimiento de objetivos

Antes de llevar a cabo el ajuste de la red existente, pueden establecerse los objetivos que deben esperarse mediante el uso de la relación entre áreas y energía. Para fines de diseño, esa relación tiene la forma típica dada por la Figura 11.7. Cuando el $\Delta T_{mín}$ es pequeño, los requerimientos mínimos de energía son relativamente bajos a expensas de áreas requeridas en los intercambiadores de calor relativamente grandes; este compromiso se invierte para valores de $\Delta T_{mín}$ grandes. El problema es poder definir una curva conceptualmente equivalente para poder establecer objetivos que guíen la modificación de redes existentes.

Consideremos el caso mostrado en la Figura 11.8, donde se ubican el consumo real energético de una red y su área instalada con respecto a los requerimientos mínimos. Como una aproximación, la relación entre el área mínima y el área real de la red puede usarse para construir una curva auxiliar que conserve esa proporción constante. Aunque la función que guarda esta relación a medida que el consumo de energía mejora no es necesariamente así de simple, esta curva auxiliar permite aproximar los objetivos que pueden esperarse referentes al área adicional requerida para soportar un ahorro adicional de energía determinado. A su vez, estos valores dependen del valor de $\Delta T_{mín}$ que se use para la revisión de la red.

Un procedimiento que puede usarse para pronosticar los resultados del ajuste de la red es trazar una curva auxiliar con α constante y tomarla como el lugar geométrico del compromiso esperado entre área y energía. De esta mane-

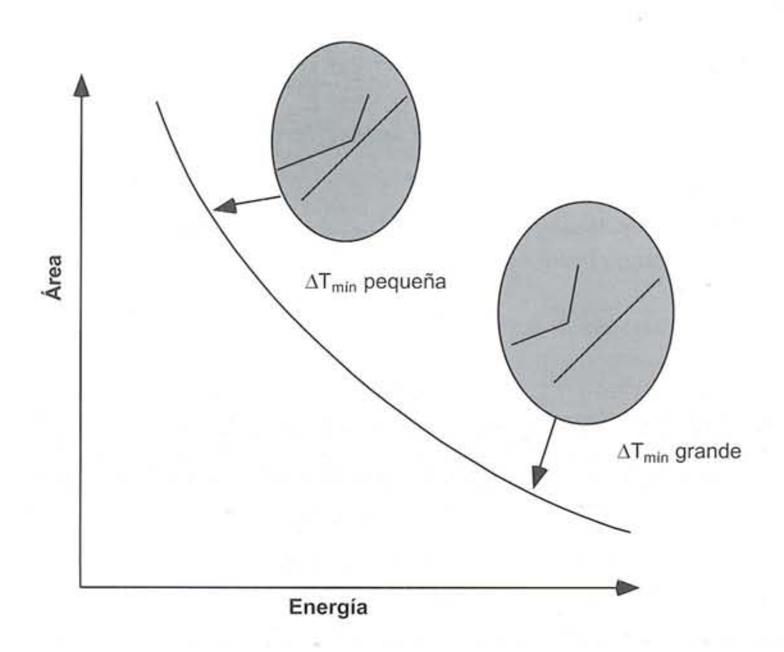


Figura 11.7
Requerimientos mínimos de área frente a energía para diseño de redes de intercambiadores.

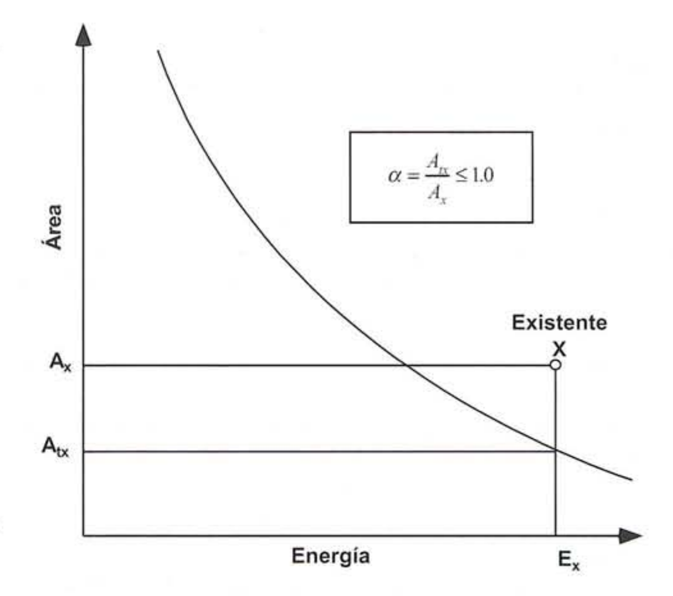


FIGURA 11.8
Ubicación de las características de la red existente.

ra, puede hacerse un listado o una nueva curva que relacione los ahorros potenciales contra la inversión adicional y tomarla como una posible fuente de establecimiento de $\Delta T_{mín}$. Un parámetro económico que puede usarse como una medida de respaldo para establecer este valor buscado de $\Delta T_{mín}$ es el tiempo de recuperación de capital. Un inversionista esperaría un compromiso adecuado que le permitiera un ahorro suficiente de energía sin esperar un largo tiempo para recuperar la inversión hecha. Es de esperarse que mayores ahorros de energía impliquen mayores niveles de inversiones extra. Si se deseara una alternativa que tuviera un año de recuperación de capital como restricción, el punto de la curva que refleja este compromiso proporcionaría el valor de $\Delta T_{mín}$ que debería usarse para el ajuste de la red.

REFERENCIAS

Las ideas fundamentales del uso del punto de pliegue en la revisión de redes existentes aparecieron en

Tjoe, T.N. y B. Linnhoff, "Using Pinch Technology for Process Retrofit", *Chem. Engng.*, 28, 47-60 (1986).

Trabajos que han hecho uso de herramientas de programación matemática para el análisis de redes existentes incluyen:

Ciric, A.R. y C.A. Floudas, "A Retrofit Approach for Heat Exchanger Networks", *Computers Chem. Engng.*, 13, 6, 703-715 (1989).
Kovac Kralj, A. y P. Glavic, "Retrofit of Complex and Energy Intensive Processes", *Computers Chem. Engng.*, 21, S517-S522 (1997).

PROBLEMAS

11.1 Considere la red existente que opera de acuerdo a la información que se proporciona en la figura. Se desea hacer un diagnóstico de esa red y proponer alguna modificación que mejore su eficiencia, en caso de que esto sea posible.

a) Estime el consumo de energía de la red bajo su esquema de operación actual.
b) Estime el consumo mínimo de energía que tendría esa red usando una ΔT_{min} de 10°C, que es la mínima diferencia de temperaturas que se observa en la red existente. Indique cuál es el potencial de ahorro de energía que tiene esa red (p.e. cuánta es la cantidad de energía que puede ahorrarse).
c) Proponga un cambio en el diseño de la red que mejore la eficiencia de recuperación de energía. Reporte los detalles técnicos de esa modificación.
d) En base a los costos de equipo y de energía que se esperan, estime el tiempo de recuperación de capital que se tendría al implementar esa modificación.

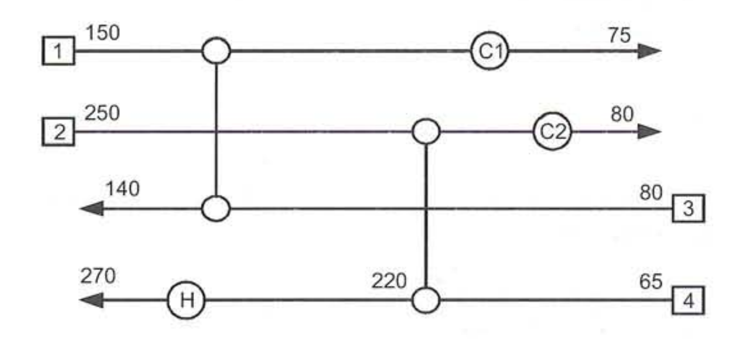
Inversión en equipo:

$$C_{eq} = 13{,}000 + 1{,}000\ A^{0.83}\ \$\ (A \text{ en } m^2)$$

Costo de vapor:

$$C_{vap} = 95{,}040\ \$/\text{MW-año}$$

donde MW = megawatts.



Todas las temperaturas están dadas en °C.

Datos de las corrientes:

Corriente	WCp, kW/°C	Coeficiente de película W/m^2 °C
1	100	500
2	50	400
3	70	300
4	40	200

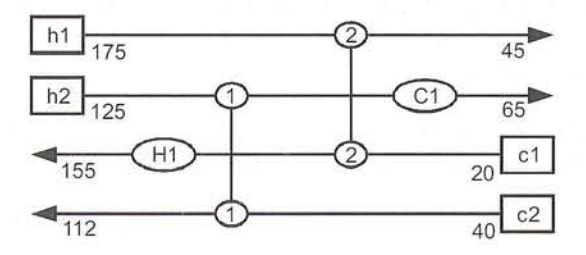
11.2 Considere las corrientes de un proceso petroquímico:

Corriente	T ent, °C	T sal, °C	WCp, kW/°C	h, kW/°C m^2
h1	750	350	45	0.1
h2	550	250	40	0.4
c1	300	900	43	0.2
c2	200	550	20	0.2

Se ha diseñado una red que consume la mínima cantidad de servicios para una ΔT_{min} de 50°C.

a) Reproduzca un diseño que cumpla con las características mencionadas.
b) Suponga que se desea hacer una revisión de esa red, usando ahora un valor de ΔT_{min} de 10°C. ¿Cuál es el potencial de ahorro de la red?
c) Efectúe la revisión de la red. Reporte la red revisada y estime el tiempo de recuperación de capital. Suponga los datos económicos del problema anterior.

11.3 La siguiente red forma parte de un proceso industrial.



A continuación, se dan las propiedades de las corrientes involucradas en la red.

Corriente	WCp (kW/°C)	h (kW/°C m^2
h1	10	0.2
h2	40	0.2
c1	20	0.2
c2	15	0.2

Los valores de las áreas de los equipos instalados son:

Intercambiador	Área (m^2)
H1	267
1	359
2	256
C1	217

a) Demuestre que para una ΔT_{min} de 10°C, la carga mínima de calentamiento es de 300 kW.

b) Compare los requerimientos energéticos mínimos con los reales, y en caso de haber diferencia proponga los cambios que puedan mejorar la eficiencia de la red. De ser posible, proponga una red revisada que consuma la mínima cantidad de energía.

c) Calcule los requerimientos mínimos de área proceso-proceso y compárelos con el respectivo valor de área instalada. ¿Cuál es la eficiencia de uso de área en la red original? ¿Cuánto mejora este valor en la red revisada?

d) Estime el tiempo de recuperación de capital suponiendo que los costos de inversión adicional y de servicios pueden calcularse mediante las siguientes expresiones:

Inversión adicional = a + b (área)^c

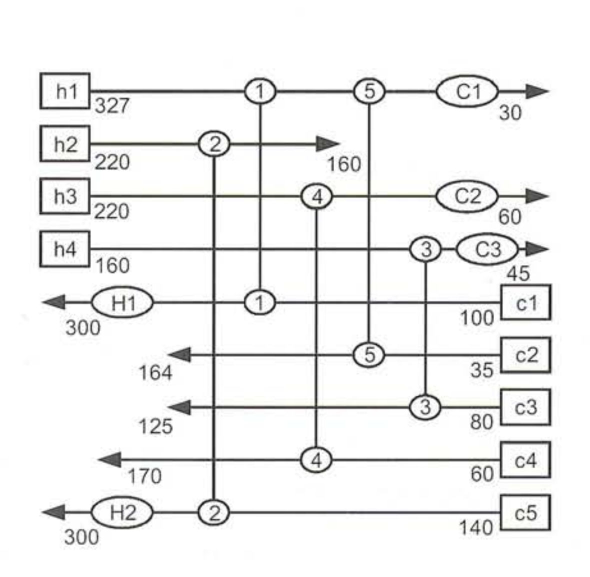
donde a = 30,800; b = 750 y c = 0.83, con área en m^2.

Costo de servicios = d (servicio de calentamiento) + e (servicio de enfriamiento)

donde d = 110 y e = 10 $/kW año.

11.4 Considere la red instalada del problema anterior. Si se fija un valor de ΔT_{min} de 20°C, la carga mínima de calentamiento es de 605 kW. Repita el análisis para este nuevo valor de ΔT_{min}.

11.5 Cuatro corrientes calientes y cinco corrientes frías se han usado para diseñar la red que se muestra en el siguiente diagrama.



WCp KW/°C	h KW/°C m^2
100	0.8
160	0.5
60	2.0
200	0.4
100	5.0
70	1.0
175	0.5
60	0.2
200	0.8

Temperaturas en °C.

Las áreas de la red instalada son las siguientes.

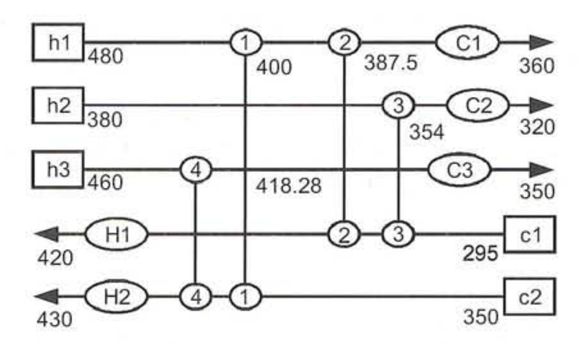
Intercambiador	Área (m^2)
1	300
2	1222
3	939
4	726
5	828
C1	575
C2	123
C3	1241
H1	46
H2	338

a) Usando un valor de $\Delta T_{mín} = 20°C$, estime los requerimientos mínimos de energía.

b) Lleve a cabo una revisión de la red a partir de los principios fundamentales del punto de pliegue.

c) Tomando las ecuaciones de costos del problema anterior, estime el tiempo de recuperación de capital requerido para la red revisada que ha propuesto.

11.6 Se desea hacer un análisis sobre la eficiencia con la que la red instalada que se muestra consume energía.



Las corrientes del proceso tienen los siguientes valores de flujo calorífico.

Corriente	WCp (kW/°C)
h1	52
h2	45
h3	37
c1	26
c2	125

Para un análisis preliminar, se puede tomar el valor del coeficiente de película como 0.6 kW/°C m^2 para todas las corrientes. La siguiente tabla proporciona la información del área instalada para cada intercambiador de calor.

Intercambiador	Área (m^2)
1	195
2	53
3	80
4	107
C1	14
C2	17
C3	24
H1	33
H2	114

a) Use un valor de $\Delta T_{mín}$ de 15°C y compare la energía consumida por la red instalada con la energía mínima requerida.

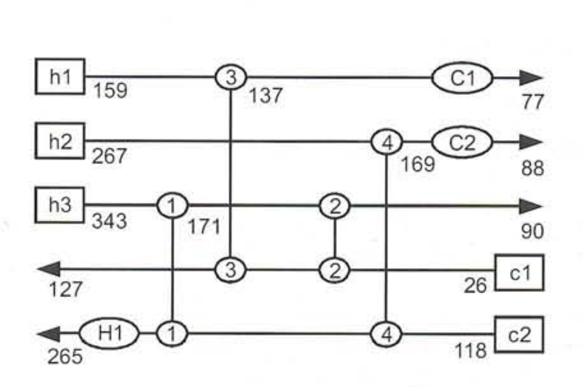
b) Realice los cambios necesarios a la red instalada para maximizar su nueva eficiencia térmica.

c) Estime el área mínima requerida por la red. Compare este valor con el área instalada de la red original y con el área requerida por la red revisada.

d) Estime el tiempo de recuperación de capital. Tome como base las ecuaciones de costos del problema 11.3.

11.7 Considere la red existente y los datos usados en el Ejemplo 11.1. Proponga una red revisada usando ahora un valor de $\Delta T_{mín}$ de 30°C. Compare la red que propone con la obtenida en el ejemplo, y discuta el efecto que se observa con este cambio de valor de $\Delta T_{mín}$.

11.8 Se han usado cinco corrientes de proceso para diseñar la siguiente red industrial. Los datos de flujos caloríficos y coeficientes de película para cada corriente se indican también en la figura.



WCp KW/°C	h KW/°C m^2
228.8	0.40
20.4	0.30
53.8	0.25
93.3	0.15
196.1	0.50

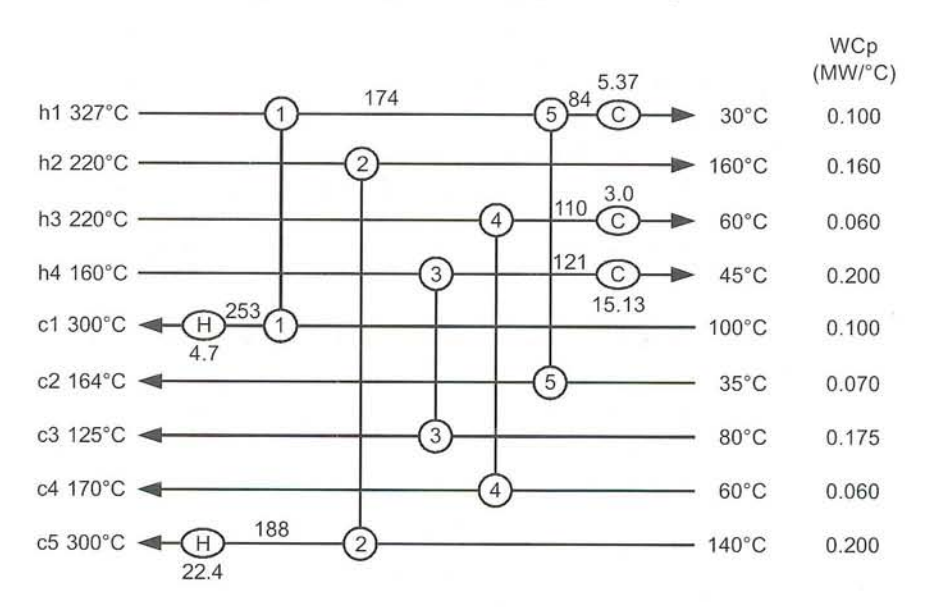
La siguiente tabla indica el valor del área instalada para cada intercambiador.

Intercambiador	Área (m^2)
1	605
2	583
3	998
4	122
5	505
C2	73
H1	401

a) Proponga una red revisada que mejore al máximo la eficiencia de la red. Use un valor de $\Delta T_{mín}$ de 20°C.

b) Estime el tiempo de recuperación de capital que se requiere para la red revisada suponiendo el escenario económico del problema 11.3.

11.9 Tjoe y Linnhoff (*Chemical Engineering*, 47, 28 de abril de 1986) presentan la siguiente red que constituye parte de una planta de aromáticos.



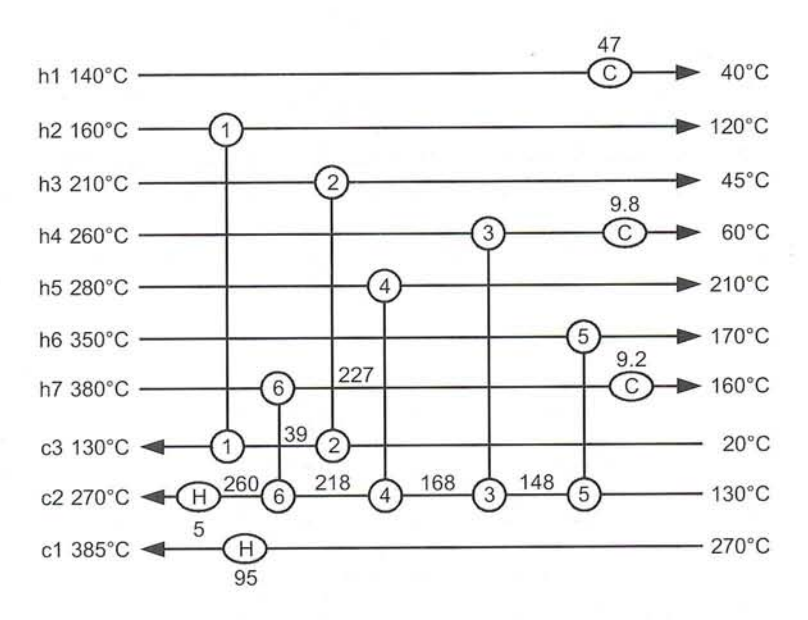
Se indican en el diagrama las cargas térmicas de cada calentador y enfriador en MW.

Se reportan los siguientes valores esperados de coeficientes de película para cada corriente involucrada en la red.

Corriente	h (W/°C m^2)
h1	800
h2	500
h3	2000
h3	400
c1	5000
c2	1000
c3	500
c4	200
c5	800

Usando un valor de $\Delta T_{mín} = 25°C$, realice un diagnóstico de la red. Incluya la propuesta de una red revisada que tienda a consumir la mínima cantidad de energía.

11.10 La siguiente red forma parte de un tren de precalentamiento de una planta de destilación atmosférica (Ahmad y Petela, *AIChE Annual Meeting*, Houston, TX, 1987).



Las cargas térmicas están indicadas para cada calentador y enfriador en MW.

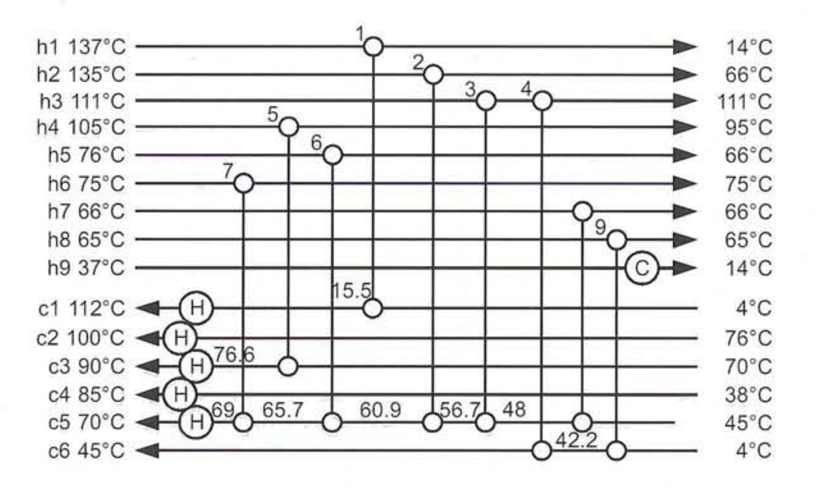
Puede tomarse un valor de los coeficientes de película de 0.8 kW/°C m^2 para todas las corrientes. A continuación se indican los caudales caloríficos de cada corriente.

Corriente	WCp (kW/°C)
h1	470
h2	825
h3	42.2
h4	100
h5	357.14
h6	50
h7	136.36
c1	826.09
c2	500
c3	363.64

a) Compare el consumo de energía de la red con el mínimo requerido si se toma como base un valor de $\Delta T_{mín}$ de 20°C.
b) Proponga una red revisada que maximice la recuperación de energía.
c) Estime el área mínima requerida por la red.
d) Si se tienen los siguientes costos:

vapor = 60$/kW año; agua = 5 $/kW año; equipo = 300 A, con A en m^2, estime el tiempo de recuperación de capital requerido para la red revisada que ha propuesto.

11.11 En una fábrica de papel se tiene la siguiente red instalada que involucra corrientes que se calientan, corrientes que se enfrían y corrientes que cambian de fase (A. Carlsson, P. Franck y T. Berntsson, *Chem. Eng. Prog.*, 3, 87, 1993).



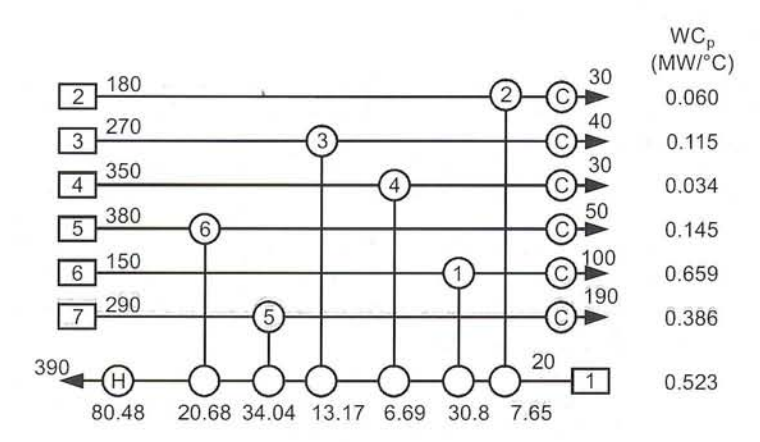
A continuación se proporcionan los datos pertinentes de las corrientes involucradas en la red.

Corriente	WCp (kW/°C)	Q (kW)	h (kW/°C m^2)
h1	5.3		4.0
h2	16.8		4.0
h3		3327	3.1
h4	135.4		1.4
h5	134.6		2.0
h6		928	3.0
h7		840	3.0
h8		12000	2.0
h9	324		4.0
c1	56.6		4.0
c2	108.1		0.9
c3	205		4.0
c4	18.4		4.0
c5	280.1		4.0
c6	314		4.0

a) Si se toma un valor de 25°C, lleve a cabo una revisión de la eficiencia de la red. Proponga los cambios necesarios para maximizar la recuperación de energía.
b) Calcule el tiempo de recuperación de capital, tomando en cuenta la siguiente información económica.

Costo de vapor = 60 $/kW-hr, costo de agua de enfriamiento = 0 $/kW-hr, costo fijo de equipo = 350 A, con A en m^2. Suponer que se laboran 8000 hr/año.

11.12 Se ha propuesto la siguiente red de recuperación de calor para una refinería (G.T. Polley, M.H. Panjeh Shahi y F.O. Jegede, *Trans. IChemE*, 68, Part A, 211, 1990).

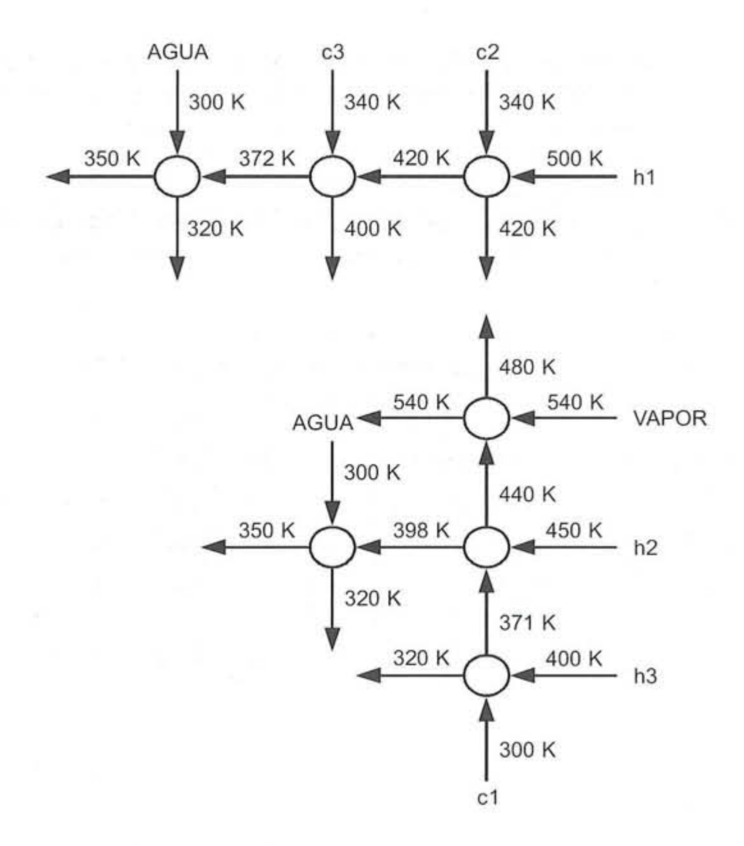


Las temperaturas se indican en °C, y las cargas térmicas asociadas con cada intercambiador se reportan en MW.

a) Indique si la red propuesta tiene un nivel máximo de recuperación de energía si se toma un valor de ΔT_{min} de 20°C.
b) Si la red tiene campo para ahorro adicional de energía, muestre los cambios que llevarían el diseño hasta su máxima eficiencia térmica.
c) Si se toman en cuenta los siguientes valores esperados de los coeficientes de película para cada corriente, calcule el área adicional proceso-proceso que se requiere para la nueva red.

Corriente	h (W/m^2 °K)
1	444
2	654
3	368
4	300
5	353
6	689
7	295

11.13 Yee y Grossmann (Report EDCR-06-25-87, Engineering Design Research Center, Carnegie-Mellon University, 1987) consideran el siguiente problema de una red existente que involucra tres corrientes calientes y tres corrientes frías.



Los flujos caloríficos de cada corriente y las áreas instaladas en la red se indican en las siguientes tablas.

Corriente	WCp (kW/°K)
h1	10
h2	12
h3	8
c1	9
c2	10
c3	8

Intercambiador	Área (m^2)
1 (h2-c1)	45.06
2 (h1-c2)	12.50
3 (h3-c1)	33.09
4 (h1-c3)	23.50
5 (vapor-c1)	5.75
6 (h1-agua)	5.39
7 (h2-agua)	11.49

El costo de vapor es de 80 $/kW año, y el de agua de enfriamiento es de 20 $/kW año.

a) Se ha reportado que el costo mínimo de servicios para un valor de ΔT_{min} de 10°C es de \$5500 /año. Corrobore si este valor es correcto.
b) Usando el valor especificado de $\Delta T_{mín}$ en el inciso anterior, revise la red existente y proponga las modificaciones necesarias para lograr el máximo ahorro de energía.
c) Ciric y Floudas (*Comput. Chem. Eng*., 13, 6, 703, 1989) usaron el siguiente modelo económico para evaluar los cambios estructurales de la red.

Costo de área adicional = 171.4 A, con A en m^2
Costo de mover un intercambiador = 10
Costo de reentubar una corriente = 400
Costo de reentubar dos corrientes = 800
Costo fijo de un intercambiador nuevo = 3460

Usando este escenario económico, cuantifique la inversión adicional y el ahorro que se obtiene en servicios para la red modificada. ¿Cuál es el tiempo de recuperación de capital?

ÍNDICE ALFABÉTICO

Algoritmo de Lee y Rudd 62, 70
Análisis económico de columnas de destilación 151, 162, 168

Beneficio bruto. Ver utilidad bruta
Beneficio extra 10
Beneficio neto. Ver utilidad neta

Cantidad mínima de calentamiento 201
Cantidad mínima de enfriamiento 201
Capital de trabajo 8
Cascada de calor 200, 201
Catálogo del SRI 21
Catálogos de tecnologías 21
Coeficientes de distribución 180, 181,186
Costo de operación 9
Costos de equipos
  Bombas centrífugas 49
  Calentadores de fuego directo 44
  Compresores de gases 50
  Enfriadores de aire 46
  Hornos de proceso 43
  Intercambiadores de calor 45
  Platos para columnas de destilación 48
  Recipientes de proceso 47
Curvas compuestas 218
Curvas compuestas balanceadas 220
Chemical Marketing Reporter 19,20

Diagramas de contenido de calor 195
Diagramas de flujo 131
Diferencia común 134
Diseño de columnas de destilación 149
Distribución de especies 131
División de corrientes 206
DTmin 194

Economías de escala 17
Ecuación de Fenske 149, 150
Ecuación de Gilliland 149, 150
Ecuación de Underwood 149, 150
Ecuaciones de Heaven 151
Energía libre de Gibbs 134
Estimación de inversiones 38

Factores de módulos 41
FOET 22
Fórmula Bath 222
Función unimodal 81

Grados de libertad 60, 70
Gran curva compuesta 220

Hydrocarbon Processing 21

Indice de factiblidad de separación 174
Indices de costos de equipos
  Chemical Engineering 14, 15
  Marshall y Stevens 15
  Nelson 15, 16
Ingeniería de procesos 130
Inversión en equipo auxiliar 9
Inversión en equipo principal 9
Inversión fija 8

Matriz de incidencia 63, 65
Método de Fibonacci 87
Método de Guthrie 40
Método de Lang 39
Método del punto de pliegue 196
Método heurístico-evolutivo 166
Modelación de procesos 60

Número mínimo de unidades 202

Precio de venta 19, 23, 25
Precios de gases 21
Precios de productos químicos 20
Predicción de áreas en redes de intercambiadores de calor 221
Principio de optimalidad de Bellman 108
Proceso Solvay 133
Procesos de separación 148
Programación dinámica 108, 160
Punto de pinzamiento. Ver punto de pliegue
Punto de pliegue. Ver método del punto de pliegue

Reacción imposible 134, 136
Regla de los 6/10 17
Reglas heurísticas para sistemas de separación 157
Revisión de redes existentes 234

Sección dorada 82
Síntesis de procesos 130
Síntesis de sistemas de separación 156
Sistemas de destilación complejos 174

Tasa de retorno 10
Técnicas de optimización 80
Tiempo de recuperación de capital 11

Utilidad bruta 9
Utilidad neta 9

Valor presente 13
Variable de diseño 63, 65, 69
Variable de reciclo 63, 69, 71



Este libro está diseñado para su uso como texto en cursos de Diseño de Procesos o afines a nivel de licenciatura de la carrera de Ingeniería Química, aunque puede usarse también para cubrir las bases sobre las que se pueden ampliar algunos de los temas de nivel de postgrado. El libro ofrece un tratado sobre diseño de procesos dividido en tres partes. En la primera parte se presentan principios fundamentales de análisis económico, apropiados para llevar a cabo un análisis rápido sobre las expectativas económicas de una tecnología disponible o de un proceso en desarrollo. En la segunda parte se introduce al lector en los principios de optimización y se presentan métodos para la optimización de sistemas unimodales. En la tercera parte se proporciona un tratado sobre síntesis de procesos, incluyen dos sistemas de reacción, sistemas de separación y sistemas con integración de energía. Se aplican en varios casos las técnicas de análisis económico y de optimización cubiertas en las dos primeras partes de la obra. Se cubren tanto enfoques heurísticos como algorítmicos para la síntesis de sistemas de separación. Una característica del tratado de este tema es que se generan reglas de diseño rápidas y efectivas que proporcionan soluciones ágiles para problemas originalmente difíciles. El tratado de integración de energía da un énfasis especial al uso de la técnica del punto de pliegue, motivado por la efectividad del método, por su amplio uso en la investigación científica de este campo, y por su marcado potencial de aplicación industrial. Se presentan métodos tanto para el diseño de redes de intercambiadores de calor como para la revisión de redes instaladas. El texto incluye un buen número de problemas resueltos y propuestos, lo que lo hace apropiado para su uso como libro de texto en esta materia. El libro puede también servir como un medio de apoyo técnico y actualización para ingenieros que trabajan en la industria química.



España

ISBN 84-291-7277-7

9 788429 172775

